



Universitat Politècnica de Catalunya



Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Caminos,
Canales y Puertos de Barcelona

Tesis de Máster en Ingeniería Ambiental

Desarrollo de un simulador numérico basado en ADM1 de un reactor anaerobio ASBR

Autor: Marco Antonio Ortiz Cabrera

Tutor: Xavier Flotats Ripoll

Barcelona, Octubre 2015

Agradecimientos

Al Dr. Xavier Flotats, por su dirección durante la elaboración de este trabajo, por la aportación de su conocimiento y por su apoyo siempre mostrado.

A todos los profesores del Master en Ingeniería Ambiental con los que tomé algún curso, por compartir su conocimiento.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México (CONACyT) y al Instituto de Innovación y Transferencia de Tecnología del estado de Nuevo León (I²T²), por brindarme los medios para realizar este posgrado.

A mi familia, por siempre apoyarme en mis locuras y por alentarme a seguir adelante durante esta etapa.

A mis amig@s dentro y fuera de Barcelona, por pintar una sonrisa en mi cara en los momentos de mayor estrés.

A Barcelona, por darme una agradable acogida y por ser escenario de momentos memorables en mi vida.

¡MOLTES GRÀCIES!

Resumen

Una alternativa interesante de tratamiento de residuos corresponde a la digestión anaerobio, debido a que presenta una serie de ventajas que hace atractivo su desarrollo, entre las que destaca la producción de biogás rico en metano como fuente de energía. Entre las tecnologías disponibles en los procesos de digestión anaerobia se encuentran los reactores anaerobios secuenciales discontinuos, ASBR (por sus siglas en inglés Anaerobic Sequencing Batch Reactor), el cual tiene un funcionamiento en cinco etapas, llenado, reacción, sedimentación, purga y descarga. Además, entre sus características principales son su diseño y su flexibilidad operativa. Una aplicación interesante para estos reactores corresponde al tratamiento de compuestos que generan ciertas características inhibitorias a los microorganismos encargados de las diferentes etapas de la degradación de la materia orgánica durante la digestión anaerobia.

En el presente trabajo se desarrolla un simulador en MATLAB® que arroja el comportamiento de un reactor anaerobio ASBR en el tratamiento de purines de cerdo, los cuales presentan características inhibitorias debido a la alta concentración de amonio que poseen. El simulador representa el comportamiento cíclico que tiene un reactor ASBR. Una característica del simulador es que limita la duración de la etapa de reacción a la producción acumulada de biogás, así como la existencia de la etapa de purga a una concentración límite de sólidos en suspensión volátiles. El simulador se desarrolla en base al modelo de digestión anaerobia ADM1 desarrollado por la IWA (International Water Association), el cual tiene en consideración 19 procesos y 24 componentes dentro de la digestión anaerobia. Debido a las características inhibitorias del sustrato considerado, además de los procesos incluidos en el ADM1, se tomó en cuenta la cinética de la población de bacterias SAO los cuales son menos sensibles a la inhibición por amonio.

Utilizando parámetros obtenidos de la literatura, el simulador desarrollado mostró que los resultados obtenidos son similares a los reportados por otros autores en las curvas de las curvas de sustrato, biogás y metano. Con la adhesión de la cinética de las bacterias SAO se logró observar el efecto inhibitorio del amonio en la población de bacterias metanogénicas acetoclásticas y el comportamiento sintrófico entre las bacterias SAO y los metanógenos hidrogenófilos.

Abstract

An interesting alternative waste treatment corresponds to the anaerobic digestion, because it has a number of advantages that make attractive its development, among which the production of methane rich biogas as an energy source stands out. Among the technologies available in anaerobic digestion processes are the anaerobic sequencing batch reactors (ASBR) , which has a five-stage operation: filling, reaction, settling, purge and withdrawal. In addition, its main features are its design and operational flexibility. An interesting application for these reactors corresponds to the treatment of compounds that generate certain inhibitory characteristics for the microorganisms responsible for the different stages of degradation of organic matter during anaerobic digestion.

In this paper a simulation in MATLAB® is developed showing the behavior of an ASBR reactor treating pig manure, which have inhibitory characteristics due to the high concentration of ammonium. The simulator represents the cyclical behavior of an ASBR reactor. A characteristic of the simulator is that it limits the duration of the reaction stage to the cumulative biogas production and the existence of the purge stage to a limit concentration of volatile suspended solids. The simulator is developed based on the anaerobic digestion model ADM1 developed by the IWA (International Water Association), which takes into account 19 processes and 24 components in anaerobic digestion. Due to the inhibitory substrate characteristics, in addition to the processes included in the ADM1, the kinetics of the SAO bacteria population which are less sensitive to inhibition by ammonia, were considered.

Using parameters obtained from the literature, the developed simulator showed that the results obtained are similar to those reported by other authors in substrate, biogas and methane curves. With the incorporation of the kinetics of the SAO it was possible to observe the inhibitory effect of ammonium on the population of acetoclastic methanogens bacteria and the syntrophic behavior among the hydrogenotrophic methanogen bacteria population and the SAO bacteria population.

Índice

Agradecimientos	II
Resumen	III
Abstract	IV
Índice de Figuras	VII
Índice de Tablas	VIII
1. Introducción + Objetivo	1
1.1. Introducción	1
1.2. Objetivo	3
2. Digestión Anaerobia	4
2.1. Introducción	4
2.2. Etapas de la digestión anaerobia	5
2.3. Condiciones ambientales de la digestión anaerobia y efectos ambientales	7
2.3.1. Temperatura	8
2.3.2. pH	8
2.3.3. Sulfuro	9
2.3.4. Hidrógeno	9
2.3.5. Ácidos Grasos Volátiles (AGV)	10
2.3.6. Amonio	10
2.4. Oxidación Sintrófica de Acetato	11
3. Tecnologías Anaerobias	14
4. Reactor anaerobio por lotes secuenciales (ASBR)	16
4.1. Factores que afectan el rendimiento de un ASBR	17
4.1.1. Agitación o mezclado	17
4.1.2. Relación sustrato - microorganismos	18
4.1.3. Características geométricas del reactor	19
4.1.4. Estrategia de alimentación	19
5. Modelización de la digestión anaerobia	20
5.1. Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1)	20
6. Metodología	24
6.1. Consideraciones para el desarrollo del simulador	24
6.2. Desarrollo del simulador	24
6.3. Tipología del sustrato	28
6.4. Dinámica de las bacterias SAO en ADM1	31
7. Resultados + Discusión	39
8. Conclusiones	49
9. Bibliografía	50

10. Anexos.....	56
10.1. Cálculo de coeficientes cinéticos de bacterias SAO	56
10.1.1. Reacción global y coeficiente de rendimiento de crecimiento	56
10.1.2. Coeficientes de estequiométricos	58
10.1.3. Tasa máxima de consumo de sustrato (Km)	59
10.2. Rutina ASBR en MATLAB®.....	60
10.3. Función FeedS	63
10.4. Cinética de crecimiento de bacterias SAO en ADM1	64

Índice de Figuras

Figura 1-1 Etapas de la digestión anaerobia (Appels et al., 2008).....	6
Figura 4-1. Etapas de un reactor ASBR. Adaptado de Fiotto (2013).....	16
Figura 7-1. Comportamiento de la producción acumulada de biogás (m3) en un reactor ASBR.	40
Figura 7-2. Comportamiento de los sólidos en suspensión volátiles (SSV) en el reactor.	41
Figura 7-3. Comportamiento de la producción diaria de biogás y su calidad respecto al porcentaje de CH ₄	42
Figura 7-4. Comportamiento de la relación alimento - microorganismos (F/M) en el reactor ASBR.	43
Figura 7-5. Comportamiento de las concentraciones de AGV en el reactor ASBR.....	44
Figura 7-6 Comportamiento del pH con respecto a la concentración de CI en un reactor ASBR.	44
Figura 7-7. Comportamiento del Nitrógeno Inorgánico en un reactor ASBR.....	45
Figura 7-6. Comportamiento de la biomasa metanogénica y biomasa SAO dentro del reactor ASBR.	46
Figura 7-7. Comportamiento de las poblaciones bacterianas encargadas de la acidogénesis dentro del reactor ASBR.	47
Figura 7-8. Comportamiento de las poblaciones bacterianas encargadas de la acetogénesis dentro del reactor ASBR.	47
Figura 7-9. Comportamiento de la DQO biodegradable en el reactor ASBR.	48

Índice de Tablas

Tabla 2-1. Recopilación de parámetros cinéticos de algunas bacterias SAO. Adaptado de (Hattori, 2008).	13
Tabla 3-1. Clasificación de reactores anaerobios según la velocidad de degradación de la materia orgánica.....	14
Tabla 5-1. Procesos de la DA considerados en el modelo ADM1.	22
Tabla 5-2. Variables dinámicas de estado que intervienen en el modelo ADM1.	23
Tabla 6-1. Descripción general de las entradas y salidas de las funciones que alimentan la rutina principal ASBR.	25
Tabla 6-2. Descripción de parámetros de entrada en la rutina ASBR.	27
Tabla 6-3. Descripción de datos de la matriz A generada por la rutina 'ASBR'.	27
Tabla 6-4. Descripción de datos de la matriz B generada por la rutina 'ASBR'.	28
Tabla 6-5. Parámetros de operación utilizados para la simulación de un ASBR.	28
Tabla 6-6. Rango de valores de potencial de metano (B_0) para purines de ganado en (m^3 CH_4/kg SV) (IPCC, 1996).	29
Tabla 6-7. Características y fracción bioquímica de purines de cerdo. Adaptado de Girault et al. (2012)	30
Tabla 6-8. Porcentajes de fraccionamiento del sustrato con respecto a la DQO_{total} . Adaptado de Girault et al. (2012)	30
Tabla 6-10. Coeficientes de reacción bioquímica y ecuaciones de compuestos particulados.	33
Tabla 6-11. Velocidades de reacción para los procesos del ADM1 considerando los procesos de las bacterias SAO. Adaptado de (Bastone et al., 2002).	34
Tabla 6-12. Coeficientes de estequiométricos del carbón inorgánico y nitrógeno inorgánico.	38
Tabla 6-13. Valores de tasa máxima de consumo de sustrato (k_m) para bacterias SAO.	38
Tabla 7-1. Resultados de la simulación del funcionamiento de un reactor ASBR para el tratamiento de purines de cerdo.....	39

1. Introducción + Objetivo

1.1. Introducción

Un problema inaplazable al que se enfrenta la humanidad hoy en día es el cambio climático. Se ha observado en años recientes el efecto que está teniendo y tendrá el aumento de la temperatura global sobre los ecosistemas y la fauna, así como en las cadenas alimenticias y la vida humana. En los últimos años se ha generado consenso de que el calentamiento global se debe a la gran escala de las emisiones antropogénicas de gases de efecto invernadero, que son generadas, en su mayoría, por la producción de energía.

De acuerdo con la Agencia Internacional de Energía (IEA por sus siglas en inglés), al año 2012 los combustibles fósiles representaron un 81.7% del suministro de energía primaria en el mundo, mientras que las fuentes renovables sólo contribuyeron un 13.5% (IEA, 2014).

En este contexto, está claro que las energías renovables deberán tener un papel protagonista dentro de los planes energéticos y medioambientales de los países, sobretodo aquellos en vías de desarrollo.

En este sentido, la energía a partir de biomasa y residuos se considera como una de las futuras fuentes de energía renovables más dominantes, sobre todo desde que la generación de potencia continua de estas fuentes puede ser garantizada, a diferencia de otros tipos, como la energía solar y la energía eólica. Los materiales de desecho como los lodos de depuradora, purines y residuos de cultivos son de especial importancia ya que estas fuentes no compiten con los cultivos alimentarios en el uso de las tierras agrícolas (Appels et al., 2011).

La aplicación de la digestión anaerobia ha recibido una creciente atención en los últimos años como un método adecuado para la generación de energía y tratamiento de aguas residuales municipales, agrícolas e industriales, así como en el tratamiento de lodos municipales, residuos industriales orgánicos, incluyendo desechos del procesamiento de frutas y hortalizas, y desechos agrícolas (Keshtkar et al., 2001; Parkin & Miller, 1983), y la cantidad de sustrato digerido anaeróbicamente a partir de residuos ha aumentado a una tasa de crecimiento anual del 25% (Buffiere et al., 2008).

La digestión anaerobia proporciona una alta remoción de DQO y de sólidos en suspensión (SS), a la par de la producción de una fuente recuperable de energía en forma de biogás. Además

genera muy baja cantidad de lodos y no requiere aireación o pretratamiento químico (Massé et al., 2000). El biogás producido consta de aproximadamente 65% de CH_4 , 35% de CO_2 y los gases traza como H_2S , H_2 y N_2 (Appels et al., 2011). En comparación con otros combustibles fósiles, el metano produce pocos contaminantes atmosféricos y genera menos dióxido de carbono por unidad de energía (Chynoweth et al., 2001). Tanto el dióxido de carbono y el metano son gases de efecto invernadero potentes y se cree que posiblemente el 18% del calentamiento global es causado por las emisiones de metano de origen antropogénico (Ghosh, 1997). El dióxido de carbono liberado por la mineralización natural se considera neutro en términos de emisión de gases de efecto invernadero. Por lo tanto, la digestión anaerobia de materia orgánica resulta beneficiosa para el medio ambiente en dos formas: al contener los procesos de descomposición en un ambiente cerrado, impidiendo al metano, potencialmente dañino, entrar en la atmósfera, y la posterior combustión del metano liberará dióxido de carbono neutro de nuevo al ciclo del carbono (Ward et al., 2008).

Entre las tecnologías disponibles en procesos de digestión anaerobia se encuentran los reactores anaerobios de los cuales hay diferentes tipos y configuraciones. Cada configuración puede ser óptima para una determinada aplicación, pero no adecuada para otra. El tipo de sustrato y la estrategia de operación deseada influirán en la elección del tipo y diseño del reactor (Zaher, 2005).

Los reactores de tipo ASBR, se caracterizan por una gran flexibilidad de operación y ventajas fundamentalmente cinéticas. Debido a esta última ventaja, una aplicación interesante de estos reactores podría corresponder al tratamiento de compuestos de difícil degradación o compuestos que generan ciertas características inhibitorias a los microorganismos encargados de las diferentes etapas de la degradación de la materia orgánica durante la digestión anaerobia. Debido a que estos reactores pueden estar sometidos diferentes perturbaciones como son presencia de compuestos inhibitorios, u otro efecto negativo, como la variación de algún parámetro operacional (temperatura o pH), es atractivo estudiar las condiciones más adecuadas de operación (Donoso-Bravo et al., 2009 I).

Los reactores anaerobios son sistemas cerrados y su funcionamiento no sólo puede depender de observaciones directas del operador. El proceso es complejo. Muchas variables deben ser supervisados con frecuencia para el seguimiento de la operación de la planta y evitar perturbaciones en el proceso. Por lo tanto, es necesaria la implementación de herramientas avanzadas de modelación para comprobar y optimizar el diseño de un reactor antes de invertir en la construcción de la planta y la instalación, además de analizar datos operativos, apoyar las

decisiones de operación, las estrategias del plan de control y tomar acciones de control. (Zaher 2005)

Con la modelación se pretende obtener una mejor comprensión de la dinámica del proceso de digestión anaerobia para el caso particular en el que desee aplicar este proceso, obteniendo las condiciones óptimas de operación y llegar a un diseño basado en el modelo.

Para el análisis de funcionamiento y desarrollo de la tecnología, se recomienda un modelo complejo como el ADM1, con extensiones adicionales como sea necesario para hacer frente a factores tales como la oxidación sintrófica de acetato (Bastone, 2006).

1.2. Objetivo

El objeto general del presente trabajo es el desarrollo de un modelo numérico basado en ADM1 de un reactor ASBR tratando un residuo con elevada concentración de amonio (NH_4), a fin de conocer, mediante simulación, el comportamiento del reactor.

El modelo que se desarrolle servirá para guiar el estudio experimental que se inicia en el laboratorio de bioreactores del Campus del Baix Llobregat, tratando purines de cerdo y otros residuos orgánicos líquidos.

2. Digestión Anaerobia

2.1. Introducción

La digestión anaerobia es un proceso complejo que se lleva a cabo en una serie de etapas diferenciadas y depende de la actividad coordinada de diversas poblaciones de microorganismos anaerobios para poder degradar la materia orgánica (sustrato) y transformarla principalmente en CO_2 y CH_4 (Appels et al., 2008). Aunque también, productos tales como nitrógeno, óxidos de nitrógeno, hidrógeno, amoníaco, sulfuro de hidrógeno y otros compuestos volátiles, son generados en cantidades menores al 1% del total del volumen del gas producto de la digestión anaerobia (Angelidaki & Sanders, 2004).

Se dice que un compuesto es biodegradable si puede ser descompuesto por la acción de microorganismos. Los microorganismos pueden utilizar este compuesto como fuente de energía y como fuente de carbono. Un compuesto puede ser mineralizado, es decir, convertido además de a nueva biomasa microbiana en productos de carbono finales, es decir, a dióxido de carbono y metano. En algunos casos la mineralización completa no se ve y el compuesto puede estar involucrado en el metabolismo microbiano con sólo la transformación del compuesto a productos intermedios, pero sin la conversión total a productos finales (Angelidaki & Sanders, 2004).

A diferencia de los microorganismos aerobios, los anaerobios utilizan poca energía de la que tienen disponible, tienen una baja velocidad de crecimiento y utilizan poco material orgánico para construir su masa celular. Esto presenta la ventaja de dejar energía disponible en forma de CH_4 y que los microorganismos representen una fracción muy pequeña de la materia orgánica residual que queda al final del proceso (Flotats, 2014).

La naturaleza y composición química del sustrato condiciona la composición cualitativa de la población de microorganismos de cada etapa, de manera que se establece un equilibrio, frágil o estable según la composición y operación del sistema. Los equilibrios químicos que se establecen en el medio líquido y los equilibrios de algunas especies, como el dióxido de carbono (CO_2) entre el medio líquido y el gaseoso, también afectan el desarrollo del proceso y su rendimiento (Flotats, 2014).

Existen varios rangos de temperatura para el proceso de digestión anaerobia: una zona termófila con temperaturas por encima de los 45°C , una zona intermedia o mesófila (con

temperaturas entre los 28°C y 45°C, y una zona de psicrófila con temperaturas por debajo de 25°C (Keshtkar et al., 2001).

En comparación con la digestión mesofílica, la digestión anaerobia termófila tiene beneficios adicionales, incluyendo un alto grado de estabilización de residuos, la destrucción más exhaustiva de patógenos virales y bacterianos, y un mejor post-tratamiento de deshidratación de lodos. Sin embargo, a pesar de estos beneficios, la mala estabilidad operacional impide que la digestión anaerobia sea ampliamente comercializada (Chen et al., 2008).

La valorización del biogás producido es eficiente energéticamente y respetuoso con el medio ambiente debido a la baja emisión de contaminantes peligrosos. En la mayoría de los casos, el biogás se valoriza energéticamente en una instalación de cogeneración para la generación simultánea de calor y electricidad (Appels et al., 2011).

El lodo producido (digestato) es rico en nitrógeno y puede en la mayoría de los casos (dependiendo de la naturaleza de la biomasa) ser utilizado en la agricultura como un fertilizante y/o enmienda orgánica (Tambone, 2009).

A pesar de estas ventajas, la digestión anaerobia presenta algunas limitaciones que son inevitables como la descomposición parcial de la fracción orgánica, las bajas velocidades de reacción y grandes volúmenes de los digestores, la vulnerabilidad del proceso para diversos inhibidores, así como la presencia de constituyentes no deseados en el biogás generado. (Appels et al., 2008).

2.2. Etapas de la digestión anaerobia

La digestión anaerobia se lleva a cabo en cuatro etapas: hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis como se muestra en la Fig. 1-1.

La hidrólisis es la primera etapa del proceso de digestión anaerobia y consiste en la degradación de compuestos orgánicos y compuestos de alto peso molecular tales como lípidos, proteínas y carbohidratos solubles, a compuestos orgánicos simples tales como azúcares simples, ácidos grasos de cadena larga (AGCL), aminoácidos y alcoholes, por la acción de enzimas extracelulares (proteasas, lipasas y celulasas) (Bastone et al., 2000; Appels et al., 2008). Estos sustratos pueden ser asimilados por las bacterias acidogénicas o fermentativas para llevar a cabo los procesos básicos del metabolismo bacteriano (Fiotto, 2013). Los microorganismos responsables de que se lleven a cabo las reacciones durante la etapa de hidrólisis son:

Propionibacterium, *Bacteroides*, *Lactobacillus*, *Sporobacterium*, *Megasphaera*, *Sphingomonas* y *Bifidobacterium* (Deublein & Steinhauser, 2011).

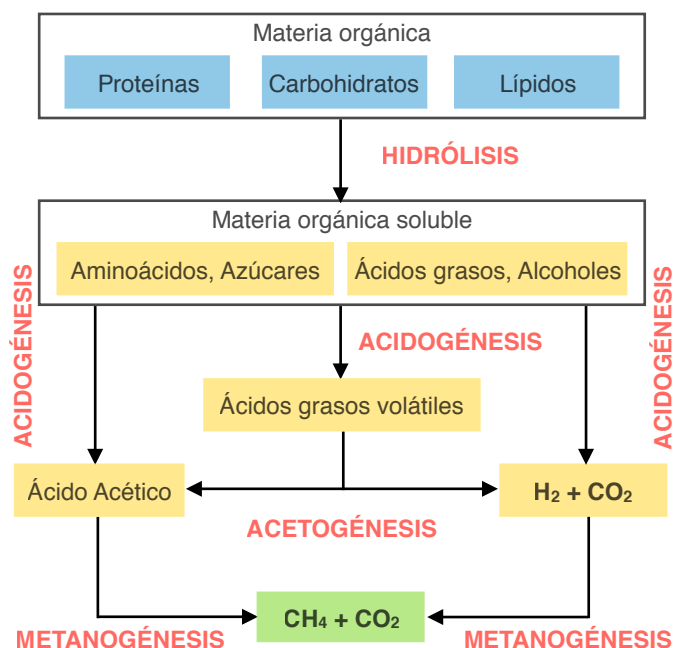


Figura 1-1 Etapas de la digestión anaerobia (Appels et al., 2008).

Existen varios factores que pueden afectar el grado y la tasa mediante la cual el sustrato se hidroliza, tales como la composición del sustrato (Lettinga, 1996; Flotats, 2014), el tamaño de partícula, pH y temperatura. La concentración de biomasa hidrolítica también es importante (Rodríguez, 2013).

Una vez ocurrida la hidrólisis tiene lugar la acidogénesis, en donde las bacterias acidogénicas fermentativas de tipo facultativo trabajan para degradar los compuestos formados durante la hidrólisis y algunos monómeros solubles existentes en el sustrato a compuestos de menor peso molecular (Galí et al., 2009; Rosenkranz, 2013). La continuidad del proceso depende de la existencia de aceptores externos de electrones, esto para mantener condiciones de equilibrio termodinámico. Si éstos no existen ocurre entonces una reacción que produce ácido acético e hidrógeno, y además se producen otros ácidos grasos volátiles (AGV), como el propiónico, butírico, etc. (Fiotto, 2013).

Para que la digestión anaerobia prosiga, es necesario que los AGV se conviertan en ácido acético (Acetogénesis acidoclástica), ya que éste es el único ácido graso que se puede metanizar (Fiotto, 2013). Es por esto que la tercera etapa de la digestión anaerobia es llamada acetogénesis. En ésta etapa los compuestos producidos en la acidogénesis, es decir, los AGV son transformados por las bacterias acetogénicas principalmente en ácido acético, dióxido de carbono

e hidrógeno (Appels et al., 2008). El hidrógeno juega un papel de intermediario importante en este proceso, ya que la reacción sólo se produce si la presión parcial de hidrógeno es lo suficientemente baja como para permitir que termodinámicamente la conversión de todos los ácidos (Rosenkranz, 2013). Para llevar a cabo esta disminución en la presión parcial será necesario el crecimiento simultáneo de biomasa metanogénica hidrogenófila para el desarrollo de los microorganismos acetogénicos (Flotats, 2014).

Aunque hay bacterias que pueden metanizar el hidrógeno, también existen bacterias que en las condiciones de la digestión anaerobia pueden producir Ácido acético a partir del hidrógeno, este proceso se conoce como la Acetogénesis Hidrogenoclástica o Hidrogenófila. Tiene la función primordial de mantener la presión parcial de H_2 por debajo de los límites necesarios (Fiotto, 2013).

Por último se lleva a cabo la etapa de metanogénesis, la cual se caracteriza por la conversión de los ácidos generados en la etapa de acidogénesis, en compuestos finales simples, mayoritariamente metano y dióxido de carbono. La metanogénesis se lleva a cabo mediante dos vías, la hidrogenoclástica y la acetoclástica. En la primera las arqueas metanogénicas hidrogenotróficas utilizan hidrógeno como donante de electrones y dióxido de carbono como aceptor de electrones para la producción de metano. La segunda vía es la reacción más importante en la digestión anaerobia ya que es responsable de la producción del 70% del metano en el biogas, en esta las arqueas metanogénicas acetoclásticas utilizan acetato para producir metano y dióxido de carbono (Appels et al., 2008; Fiotto, 2013).

2.3. Condiciones ambientales de la digestión anaerobia y efectos ambientales

Una de las principales causas de la inestabilidad en un reactor anaerobio es la pérdida del equilibrio entre las poblaciones de microorganismos (Demirel & Yenigün, 2002). Las poblaciones de microorganismos anaerobios se caracterizan por diferentes cinéticas de crecimiento, fisiología, necesidades nutricionales, sensibilidad a condiciones ambientales y sensibilidad compuestos intermedios como inhibidores (Pohland & Ghosh, 1971). Esto implica que cada etapa presente diferentes velocidades de reacción según la composición del substrato y que el desarrollo estable del proceso global requiera de un equilibrio que evite la acumulación de compuestos intermedios que puedan ocasionar parar o ralentizar el sistema (Flotats, 2014).

En los siguientes apartados se presentan los principales inhibidores y condiciones ambientales por los cuales se ve afectada la digestión anaerobia.

2.3.1. Temperatura

La temperatura es la variable más importante en el control de la tasa de metabolismo microbiano en ambientes anaeróbicos (Westermann et al., 1989). Esta afecta la supervivencia y el crecimiento de microorganismos, su actividad metabólica y la dinámica poblacional dentro del reactor. Así mismo, la temperatura tiene un efecto importante sobre las propiedades fisicoquímicas de los componentes que se encuentran en el sustrato de la digestión afectando su tasa de degradación (Angelidaki & Sanders, 2004; Appels et al., 2008).

En general, la temperatura afectará la digestión anaerobia de la siguiente forma:

- Aumento de las velocidades de reacción al aumentar la temperatura (Angelidaki & Sanders, 2004; Flotats, 2014)
- Disminución de las velocidades de reacción al sobrepasar la temperatura el valor óptimo ($>42^{\circ}\text{C}$ para procesos mesófilos y $>65^{\circ}\text{C}$ para procesos termófilos) (Flotats, 2014).
- Disminución de los rendimientos y aumento de la constante de afinidad (K_s) debido al aumento de la energía requerida para mantenimiento a temperaturas altas (Flotats, 2014).
- Cambios en el rendimiento y rutas de reacción debido a variaciones en los rendimientos termodinámicos y poblaciones microbianas (Flotats, 2014).
- Aumento del decaimiento celular debido al incremento de la lisis y de la energía de mantenimiento. Además, la temperatura tiene una influencia importante sobre el sistema físico-químico, debido principalmente a cambios en los coeficientes de equilibrio de las diferentes especies, tanto en el medio líquido como entre medio líquido y gaseoso (Flotats, 2014).
- El aumento de las temperaturas genera un aumento de la fracción de amoníaco libre, que desempeña un papel en la inhibición de los microorganismos (Boe, 2006).
- La temperatura tiene un efecto significativo en la presión parcial de H_2 en los digestores, por lo que influye también en la cinética del metabolismo sintrófico (Appels et al., 2008).

2.3.2. pH

El pH ejerce un efecto en casi todos los procesos celulares: consumo y almacenamiento de sustrato, crecimiento y desintegración celular y degradación de productos intermedios (Flotats, 2014). Cada grupo de microorganismos tiene un rango de pH óptimo diferente. Las bacterias metanogénicas son extremadamente sensibles al pH con un óptimo entre 6.5 y 7.2 (Boe, 2006; Turovskiy & Mathai, 2006). Los microorganismos fermentativos son algo menos sensibles y pueden funcionar en una gama más amplia de pH entre 4.0 y 8.5 (Hwang et al., 2004); a un pH bajo los principales productos son el ácido acético y butírico, mientras que a un pH por encima de 8.0 se producen principalmente ácido acético y propiónico (Boe, 2006).

La inhibición por pH es una combinación de la disrupción de la homeostasis y el aumento de concentración de ácidos débiles en su forma libre a valores de pH bajos o el aumento de concentración de bases débiles y limitaciones al transporte a valores altos de pH, y afecta a todos los microorganismos. Además, también se puede producir la inhibición de la hidrólisis a valores bajos o altos de pH debido a la desnaturalización de las enzimas (Flotats, 2014).

El pH se controla principalmente mediante el equilibrio $\text{CO}_2 - \text{HCO}_3^-$. Si la concentración de CO_2 en la fase gaseosa se mantiene constante, la posible adición de HCO_3^- puede aumentar el pH del digestor (Turovskiy & Mathai, 2006).

2.3.3. Sulfuro

Bajo condiciones anaerobias, el sulfato presente en muchos tipos de aguas residuales y residuos sólidos, es usado como aceptor de electrones por las bacterias reductoras de sulfato y transformado en sulfuro. En este caso, la inhibición ocurre a dos niveles: inhibición primaria, causada por la competición por los sustratos orgánicos a oxidar (alcoholes, ácidos orgánicos, compuestos aromáticos, ácidos grasos de cadena larga), e inhibición secundaria, causada por la toxicidad del sulfuro sobre los diferentes grupos de microorganismos. La inhibición primaria depende de la relación $\text{DQO}/\text{SO}_4^{2-}$, la toxicidad del sulfuro, la proporción relativa de bacterias reductoras de sulfato y de microorganismos fermentativos, acetogénicos y metanogénicos y de la temperatura. En cuanto a la inhibición secundaria, cabe mencionar que la forma no disociada (H_2S) es la tóxica tanto para los microorganismos metanogénicos como para las bacterias reductoras de sulfato. Las concentraciones inhibitorias varían según el tipo de microorganismo y las condiciones de operación, pero se puede establecer el siguiente rango de sensibilidad: microorganismos fermentativos < bacterias reductoras de sulfato = acetogénicos < metanogénicos (Flotats, 2014).

2.3.4. Hidrógeno

El hidrógeno molecular (H_2) se forma durante las diferentes etapas de la digestión anaerobia. En la etapa de hidrólisis las bacterias producen ácidos grasos, CO_2 e H_2 a partir de los carbohidratos. Durante la acetogénesis, los microorganismos producen acetato, CO_2 e H_2 , o acetato e hidrógeno por oxidación anaerobia de propionato y de n-butirato (Winter, 1999). En esta última etapa, el hidrógeno sólo puede formarse cuando es consumido por las bacterias metanogénicas evitando su acumulación (Appels et al., 2008). Así, la conversión de ácido propiónico y ácido butírico en ácido acético es termodinámicamente posible sólo si la presión parcial de H_2 es inferior a 10^{-5} y 10^{-4} atm, respectivamente. Además, a presiones parciales de H_2 superiores a 10^{-4} atm, es más favorable termodinámicamente la reducción del CO_2 que la

disociación del acetato. Por lo tanto, para que un digestor funcione adecuadamente, la concentración de hidrógeno disuelto debe ser muy baja (Flotats, 2014).

2.3.5. Ácidos Grasos Volátiles (AGV)

Los AGV son los intermediarios más importantes en el proceso anaerobio, ya que son los precursores de la formación de metano (Flotats, 2014). Los AGV producidos durante la digestión anaerobia tienden a reducir el pH. Esta reducción es normalmente contrarrestada por la actividad de las bacterias metanogénicas, que también producen alcalinidad en forma de dióxido de carbono, amoníaco y bicarbonato (Turovskiy & Mathai, 2006; Appels et al., 2008). No obstante, la acumulación de AGV en el reactor debido a perturbaciones en el proceso causadas por temperatura, sobrecarga orgánica, compuestos tóxicos, etc., puede resultar en concentraciones inhibitorias para los microorganismos, sobre todo los metanogénicos (Flotats, 2014).

2.3.6. Amonio

El nitrógeno amoniacal se produce durante la degradación anaerobia de compuestos nitrogenados, fundamentalmente proteínas y urea (Flotats, 2014). Las dos formas predominantes de nitrógeno inorgánico son amonio (NH_4^+) y amoníaco o amonio libre (NH_3) (AL), siendo éste último el más tóxico por su capacidad para atravesar la membrana celular y causar un desequilibrio de protones y deficiencia de potasio (Chen et al., 2008).

El nitrógeno es un nutriente esencial para los microorganismos anaerobios y, por ello, concentraciones de amonio total en torno a 200 mg/L son beneficiosas para el proceso anaerobio (Liu & Sung, 2002). Sin embargo, entre los cuatro tipos de microorganismos anaerobios, los metanógenos son los menos tolerantes y los más propensos a detener su crecimiento debido a la inhibición por amoníaco presentando una pérdida del 50% de su actividad bajo concentraciones de AL entre 400-550 mgN- NH_3 /L. Además se ha encontrado un amplio rango de concentraciones de amoníaco con efecto inhibitor que va desde 1.7 hasta 14 g de nitrógeno amoniacal total (NAT) por litro, lo cual se puede atribuir a las diferencias en los sustratos y los inóculos, las condiciones ambientales (temperatura, pH), y períodos de aclimatación (Chen et al., 2008).

Durante el tratamiento de desechos, el pH afecta la composición de NAT. Puesto que el amoníaco en forma de AL se ha considerado como el agente tóxico real, un aumento en el pH daría lugar a aumento de la toxicidad debido al incremento en la relación AL - Amonio (NH_4^+). La inestabilidad del proceso debido al amonio a menudo resulta en la acumulación de AGV, que a su vez conduce a una disminución en el pH y la disminución de ese modo la concentración de AL. La

interacción entre el AL, AGV y el pH puede conducir a un “estado estable inhibido”, una condición en la que el proceso está funcionando de manera estable pero con un rendimiento de metano inferior (Hansen et al. 1998; Chen et al., 2008).

2.4. Oxidación Sintrófica de Acetato

El acetato es uno de los intermediarios más importantes para la metanogénesis en la digestión anaerobia de materia orgánica. Se ha estimado que aproximadamente el 70-80% de metano se deriva del acetato en ambientes anaerobios, mientras que el resto está formado a partir de H_2 y CO_2 (Hattori et al., 2000).

Existen dos mecanismos para la formación de metano a partir de acetato. El primero es la metanogénesis acetoclástica. En ésta reacción, el acetato se disocia a grupos metilo y carboxilo. El grupo metilo se convierte directamente en metano a través de varias reacciones bioquímicas, mientras que el grupo carboxilo se oxida a CO_2 (Ferry, 1992). La metanogénesis acetoclástica es una reacción exergónica, por lo tanto, teóricamente, se lleva a cabo en ausencia de otras reacciones tales como la metanogénesis hidrogenotrófica (Hattori, 2008). La reacción de la metanogénesis acetoclástica, está catalizada mayoritariamente por arqueas de los géneros *Methanosarcina* y *Methanosaeta*. Mientras que las primeras dominan a altas concentraciones de acetato y presentan tasas de crecimiento superiores, las segundas dominan a bajas concentraciones de sustrato (valor de K_s inferior) y presentan baja tasa de crecimiento, por lo cual se identifica principalmente *Methanosaeta* en reactores con elevado tiempo de retención celular y baja concentración de sustrato y *Methanosarcina* en digestores con alta velocidad de carga orgánica (Flotats, 2014).

El segundo proceso consiste en dos reacciones, la oxidación sintrófica de acetato y la metanogénesis hidrogenotrófica. En la oxidación de sintrófica de acetato, ambos grupos metilo y carboxilo del acetato se oxidan a CO_2 produciendo H_2 y, estos productos, posteriormente son convertidos en metano. Energéticamente, esta reacción es extremadamente desfavorable ($\Delta G^\circ = +104.6$ kJ/mol). Sin embargo, esta reacción desfavorable puede proceder si la metanogénesis hidrogenotrófica ($\Delta G^\circ = -135.6$ kJ/mol) consume el hidrógeno. La reacción global se convierte en exergónica ($\Delta G^\circ = -31.0$ kJ/mol), con la misma estequiometría como la metanogénesis acetoclástica. La oxidación sintrófica de acetato es catalizada por bacterias sintróficas acetato-oxidantes (SAO), mientras que la metanogénesis hidrogenotrófica es catalizada por metanógenos hidrogenotróficos. Las dos bacterias obligatoriamente requieren unas de otras ya que las bacterias SAO requieren consumidores de hidrógeno (es decir, metanógenos socios) y las arqueas requieren de los proveedores de hidrógeno (es decir, bacterias SAO). Aunque esta sintrofia mutua

teóricamente produce energía, la cantidad es bastante pequeña ($\Delta G^{\circ} = -31.0$ kJ/mol). Por otra parte, las bacterias SAO y sus socios metanógenos deben compartir esta pequeña energía. Esta desventaja energética puede ser causante de que las bacterias SAO tengan un lento crecimiento y se adapten a un mutualismo rígido (Hattori, 2008).

La formación de productos por las bacterias SAO se vuelve más favorable si la concentración de hidrógeno se mantiene baja, pero a un nivel suficiente para favorecer también la metanogénesis hidrogenotrófica. Esta contrariedad restringe la concentración de hidrógeno en un rango bajo y estrecho. En condiciones termofílicas (55-60 °C), la presión parcial de hidrógeno medida en co-cultivos sintróficos está en un rango de 10-50 Pa (1×10^{-4} - 5×10^{-4} bar), donde el bajo nivel indica el umbral de utilización de hidrógeno por el metanógeno. En condiciones mesofílicas (35 °C), la concentración de hidrógeno puede ser más baja en un rango de 1.6-6.8 Pa (1.6×10^{-5} - 6.8×10^{-5} bar) resaltan la importancia de una remoción de hidrógeno eficiente por parte del metanógeno bajo condiciones mesofílicas (Westerholm, 2012).

Algunos factores ambientales importantes que influyen en la tasa de actividad anaerobia acetoclástica son la temperatura, las concentraciones de ácidos orgánicos, y la concentración de amonio. A temperaturas entre 50°C y 65°C, la oxidación de acetato se ve favorecida a bajas concentraciones de acetato, mientras que la metanogénesis acetoclástica se ve favorecida a altas concentraciones de acetato. El predominio de la oxidación de acetato a concentraciones más bajas aumenta con el aumento de la temperatura. La oxidación sintrófica de acetato es el principal mecanismo para la degradación de acetato en presencia de inhibidores, en particular de amonio y de ácidos grasos volátiles (AGV) (Angelidaki et al., 2006).

Los altos niveles de amonio, formados durante la degradación anaerobia de material rico en proteínas, han demostrado ser un factor importante que regula el cambio de la metanogénesis acetoclástica a la oxidación sintrófica de acetato en procesos mesofílicos de biogás. El cambio es probablemente una consecuencia del efecto inhibitor del amoníaco sobre la actividad de los metanógenos acetoclásticos. La concentración de acetato, tasa de dilución y la presencia de metanógenos acetoclásticos son otros factores sugeridos a tener un impacto en el desarrollo de la oxidación sintrófica de acetato (Westerholm et al., 2011).

La tolerancia de amonio de las bacterias SAO les da una ventaja competitiva en los sistemas de alta carga amoniacal. Estas bacterias, en asociación con metanógenos hidrogenotróficos tolerantes al amonio, en consecuencia, pueden adoptar el papel de los consumidores de acetato dominantes en entornos en los que el amoníaco restringe la actividad metanogénica acetoclástica (Westerholm et al., 2011).

Hasta el momento un número restringido de bacterias SAO se han aislado y caracterizado, a saber las bacterias mesófilas *Clostridium ultunense* (Schnürer et al., 1996) y *Syntrophaceticus schinkii* (Westerholm et al., 2010), el termotolerante *Tepidanaerobacter acetatoxydans* (Westerholm et al., 2011), y las bacterias termófilas *Thermacetogenium phaeum* (Hattori et al., 2000; Hattori et al., 2005) *Thermotoga lettingae strain TMO* (Balk et al., 2002) y *strain AOR* (Lee & Zinder, 1988).

En la tabla 2-1 se muestran los parámetros cinéticos de algunas de las bacterias SAO propuestos en la bibliografía.

		<i>strain AOR</i>	<i>T. phaeum strain PB T</i>	<i>C. ultrense strain BS T</i>
co-cultivo	Tasa máxima (h ⁻¹)	0.0231 - 0.0173	0.0122	0.0014 - 0.0012
	Tiempo de duplicación (h)	30 - 40	56.8	480 - 600
	pH	-	6.8	7
	Y	-	2.4 ^b	-
cultivo puro	Tasa máxima (h ⁻¹)	0.0577	0.030	0.0144
	Tiempo de duplicación (h)	12	22.8	48
	pH	-	5.9 - 8.4	5.0 - 10.0
	Y	1.1 ^a	-	197 ^c

Tabla 2-1. Recopilación de parámetros cinéticos de algunas bacterias SAO. Adaptado de (Hattori, 2008).

^a En g de masa seca / mol de acetato formado (Lee & Zinder, 1988).

^b En g SSV / mol acetato (Hattori et al., 2005).

^c En μ mol acetato / μ mol acetato consumido (Schnürer et al., 1996).

3. Tecnologías Anaerobias

En cuanto a las tecnologías anaerobias disponibles una de las características que permite hacer distinción en los reactores es la posibilidad de tratar afluentes de baja o alta carga orgánica. De acuerdo a esta característica en la tabla 3-1 se muestran algunas de las tecnologías existentes:

Reactores de baja carga	Reactores de alta carga
Reactor de mezcla completa	Reactor con recirculación de sólidos
Reactor de flujo pistón	Reactor de lecho fijo
-	Reactor de lecho fluidizado
-	Reactor de lecho de lodos granulares expandido
-	Reactor de lecho de lodos granular
-	Reactor por lotes secuenciales

Tabla 3-1. Clasificación de reactores anaerobios según la velocidad de degradación de la materia orgánica.

Dentro de las tecnologías anaerobias, los reactores de baja carga presentan el mismo tiempo de retención de sólidos (TRS) y tiempo de retención hidráulica (TRH). Sin embargo, las cinéticas de degradación microbiana de los distintos sustratos orgánicos indican que, en general, tienen dos velocidades de degradación: una alta, y una baja. Estas dos velocidades se explican por la degradación inicial más rápida de los componentes fácilmente biodegradables del sustrato y la segunda degradación más lenta de los compuestos más recalcitrantes. Debido a esto surgió la necesidad de implementar reactores donde se separe el TRS y el TRH proporcionando sedimentación y reciclaje de biomasa, y al mismo tiempo la eliminación del efluente con un contenido de carbono inferior en comparación con el afluente, surgiendo así los reactores de alta carga (Ndegwa et al., 2005).

Los reactores de baja carga son una tecnología simple ya que, generalmente, no poseen dispositivos de mezcla ni fuentes externas de energía para calentar el sustrato a digerir. Sin embargo, la producción de biogás genera una corriente ascendente que ayuda a mezclar los fangos, pero aún así, se forman estratificaciones y, además requieren de largos tiempos de retención.

En los reactores de alta carga, los lodos se mantienen en constante agitación logrando una mezcla completa, se calientan para mejorar las tasas de crecimiento bacteriano y la

alimentación de los barros es uniforme y con el mayor grado de espesamiento posible. Todas estas mejoras crean un ambiente uniforme que posibilitan reducir el tamaño del digestor, mejorar la estabilidad y la eficiencia del proceso. Los barros se mezclan por la recirculación del biogás, bombeo o mezcladores. Además son calentados por intercambiadores de calor externos. La alimentación uniforme es muy importante y los barros deben ingresar en forma continua al digestor o a intervalos regulares para ayudar a mantener las condiciones de estado estacionario y reducir los picos de carga. Esto es fundamental ya que las bacterias metanogénicas son muy sensibles a estos cambios (Fiotto, 2013).

Dentro de los reactores de alta carga sobresale el reactor por lotes secuenciales o ASBR (del inglés Anaerobic Sequencing Batch Reactor) debido a su versatilidad en el tratamiento de distintos tipos de aguas residuales. Este tipo de reactor además presenta ventaja sobre otros reactores de alta carga debido a la adaptación que presenta a diferentes estrategias de alimentación, a los altos tiempos de retención de sólidos, a que permite tratar compuestos de difícil degradación y/o tóxicos y a que se tiene un mejor control de calidad del efluente debido al manejo de los tiempos de retención hidráulicos (Rosenkranz, 2013).

4. Reactor anaerobio por lotes secuenciales (ASBR)

Un reactor anaerobio por lotes secuenciales o ASBR por sus siglas en inglés (Anaerobic Sequencing Batch Reactor), es un sistema cíclico de metanización para el tratamiento de aguas residuales. Cada ciclo se lleva a cabo en cuatro etapas: alimentación, reacción, sedimentación y descarga, además de una quinta etapa que sólo se realiza de ser necesaria, la purga (Ruiz et al., 2001). En la figura 4-1 se muestra un esquema de las etapas que se llevan a cabo en el reactor ASBR.

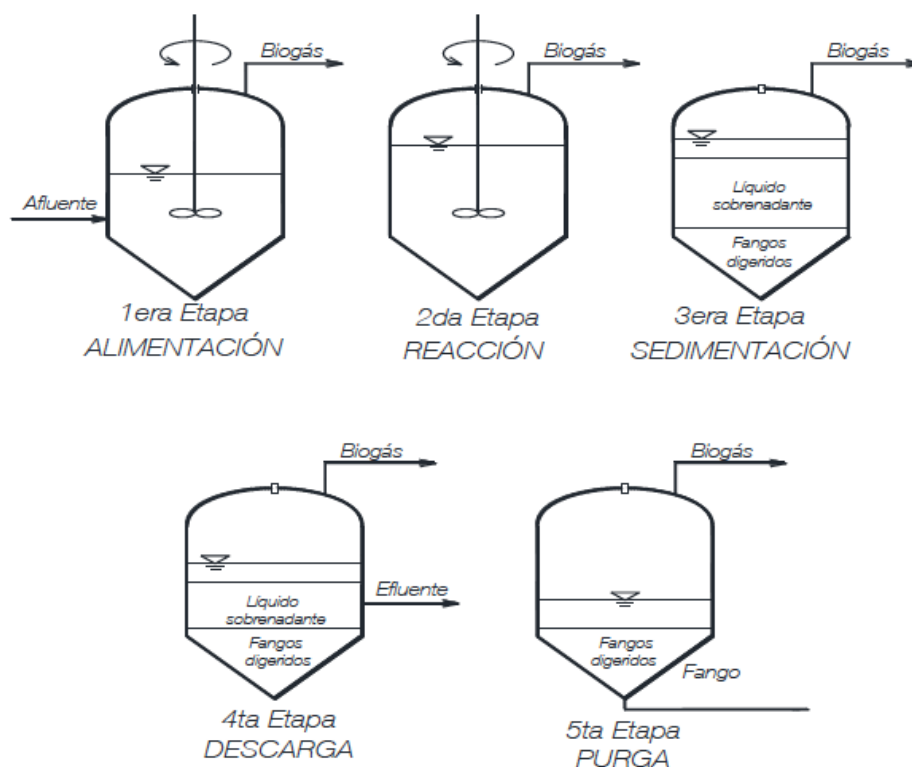


Figura 4-1. Etapas de un reactor ASBR. Adaptado de Fiotto (2013).

El funcionamiento por etapas de un ASBR permite que el tiempo de retención de los sólidos (TRS) sea independiente del tiempo de retención hidráulico (TRH) sin recurrir a un tanque de sedimentación, ya que el reactor funciona como un decantador una vez que la agitación (etapa de reacción) termina, de este modo los sólidos tienen un tiempo de residencia en el reactor mucho mayor que los líquidos (Ruiz et al., 2001). La ventaja de este diseño es que un ASBR puede tratar más volumen de sustrato por unidad de tiempo en comparación con otros reactores, reduciendo así el volumen requerido del digestor. Además, una alta relación sustrato/biomasa (F/M) inmediatamente después de la fase de alimentación asegura altas tasas iniciales de eliminación de sustrato y una mayor producción de biogás. Por otro lado, al final de la fase de reacción justo antes de la sedimentación, la relación F/M es mucho menor, lo que implica una producción de biogás mucho menor favoreciendo la floculación de biomasa y en gran medida la sedimentación.

Estas características hacen de un ASBR especialmente adecuado para el tratamiento y recuperación de biogás a partir de purines diluidos de animal que de otra manera requeriría de digestores extremadamente grandes debido a su alto contenido de agua (Ndegwa et al, 2005).

La duración del período de reacción dependerá de las características del sustrato y los requisitos de calidad del efluente. Para las aguas residuales que contienen altas concentraciones de sólidos en suspensión (SS), se requerirá más tiempo de contacto entre la biomasa y el sustrato para la hidrólisis completa de las partículas. Cuando la tasa de producción de gas se ha reducido a un mínimo, se permite que el contenido del reactor se sedimente (Massé et al., 2000).

La etapa de sedimentación es dependiente de la biomasa, que debe tener buenas características de sedimentación. El crecimiento de la biomasa en forma de gránulos es necesario para proporcionar una alta retención celular en el reactor, ya que esto mejora la separación del líquido de la fase sólida. El tiempo requerido para esta etapa puede variar de algunos minutos a varias horas. El tiempo debe ser elegido de modo que se obtenga un efluente clarificado y una concentración de biomasa granular creciente en el interior del reactor (Zaiat et al., 2001). Durante la etapa de sedimentación, la presión parcial del CO_2 por encima de la zona de líquido es constante y en equilibrio con el CO_2 disuelto. Como resultado, ninguna cantidad significativa de CO_2 se transfiere al espacio de cabeza, una situación que contribuye a la creación de condiciones de sedimentación sin reacción (Massé et al., 2000).

Cuando la biomasa forma una capa compacta en la parte inferior del reactor, el sobrenadante se extrae a un nivel predeterminado, por lo general, a cierta distancia por encima de la cama de biomasa. Durante extracción de efluentes, los microorganismos con baja capacidad de sedimentación se eliminan del reactor, dejando atrás a los flóculos bacterianos más pesados (Massé et al., 2000).

4.1. Factores que afectan el rendimiento de un ASBR

El mezclado o agitación, relación inicial entre concentraciones de sustrato y biomasa (F/M), la configuración geométrica del reactor y la estrategia de alimentación son los principales factores que afectan el rendimiento global del reactor y los cuales son descritos en los siguientes puntos.

4.1.1. Agitación o mezclado

El contenido de la mayoría de los digestores anaerobios se mezcla para asegurar un contacto eficiente entre la materia orgánica y la biomasa microbiana activa, para liberar las

burbujas de gas atrapadas en el medio y para evitar la sedimentación del material particulado más denso. La mezcla no siempre tiene lugar de forma continua; a menudo es intermitente y puede ser activa varias veces al día o varias veces en una hora, dependiendo del tipo de reactor, del tipo de agitador utilizado, y de la concentración de sólidos totales en el afluente de alimentación (Ward et al., 2008).

El tipo de agitación es muy importante durante la etapa de reacción y puede variar en gran medida. La agitación mecánica y de reciclaje del gas generado en el proceso proporcionan una mezcla de la fase líquida y la biomasa. El reciclaje del líquido aumenta el contacto líquido-sólido. La duración de esta etapa depende de las tasas de consumo de sustrato primario e intermedio (Zaiat et al., 2001).

Un cierto grado de mezclado es necesario para el contacto entre el sustrato y las bacterias, sin embargo, un mezclado excesivo puede reducir la producción de biogas. Se ha demostrado que las condiciones de mezcla a baja velocidad permiten al reactor absorber mejor las perturbaciones por el choque de carga que las condiciones de mezcla a alta velocidad, y la reducción del nivel de mezclado mejora el rendimiento e incluso logra estabilizar un digestor de mezcla continua inestable. (Ward et al., 2008)

La formación de gránulos anaerobios ha demostrado ser de gran importancia en la digestión anaerobia. Se sabe que las bacterias oxidantes de propionato y las arqueas metanogénicas viven en estrecha proximidad en gránulos con H_2 y formiato como portadores de electrones y que una agitación excesiva puede romper la estructura de estos, resultando en una reducción de la tasa de oxidación de los ácidos grasos que pueden conducir a la inestabilidad del digestor. Una combinación de algunas proteínas y carbohidratos resulta en la formación de sustancias poliméricas extracelulares (SPE), responsables de la formación de gránulos y son un indicativo del estado de formación de gránulos en el reactor (Ward et al., 2008). Ong et al. (2002) encontraron, en la digestión anaerobia de purines de ganado, que un aumento en la agitación resultó en una reducción de las SPE, sugiriendo que una menor agitación resultaría en una mejor formación de gránulos debido a la mayor presencia de SPE.

4.1.2. Relación sustrato - microorganismos

La relación inicial de concentraciones de sustrato y microorganismos (F/M) es significativa en los procesos discontinuos ya que es uno de los factores más importantes que afectan la formación de gránulos de biomasa. Una baja relación F/M resulta en la óptima granulación de lodos con buenas características de sedimentación. Según estudios, cuando se aplica una baja relación F/M se obtiene una mejor retención de biomasa en el reactor y una puesta en marcha del

reactor rápida y estable. Así mismo se ha encontrado que valores de F/M mayores a 0.5 mg DQO/mg SSV resultan en una baja eficiencia en la remoción de materia orgánica debido al lavado de lodos en el efluente. También se ha encontrado la inhibición de la actividad de la biomasa cuando la carga orgánica o la relación F/M sufren grandes fluctuaciones. De hecho, la inhibición de sustratos primarios o intermedios se produce cuando el reactor es sometido a fuertes cambios de cargas orgánicas. Las velocidades de reacción globales son sensibles a concentraciones muy altas de sustrato y, disminuirán subsecuentemente, inhibiendo la actividad de la biomasa (Zaiat et al., 2001).

4.1.3. Características geométricas del reactor

Las características geométricas del reactor pueden afectar la remoción de materia orgánica. Los reactores con un valor alto en la relación longitud-diámetro (L/D) presentaron un mejor rendimiento referente a la retención de la biomasa en forma granular que los reactores con una relación L/D baja. Sin embargo, presentaron una alta capacidad de concentración celular. Por lo tanto, es preferible el uso de una configuración con un valor alto de la relación L/D (1.83-5.60) en lugar de una configuración con valor bajo de L/D (0.61-0.93) (Zaiat et al., 2001).

4.1.4. Estrategia de alimentación

La estrategia de alimentación en un ASBR puede afectar su rendimiento ya que está directamente relacionado con la relación F/M (sustrato/microorganismos) empleada y con la retención de sólidos (Zaiat et al., 2001).

Varias estrategias de alimentación se pueden aplicar en reactores discontinuos, ajustando los valores de caudales del afluente. El ASBR suele funcionar con un tiempo de alimentación corto. Sin embargo, un tiempo corto de alimentación en un ciclo de un ASBR con sustratos de rápida formación de ácidos puede conducir a la rápida acumulación de AGV ya que las bacterias acidogénicas producen AGV más rápido de lo que pueden ser consumidos por los acetógenos y metanógenos, resultando en un bajo rendimiento del reactor. Por otra parte, el aumento en el tiempo de alimentación resulta en bajas concentraciones de sustrato en el interior del reactor, evitando sobrecargas orgánicas iniciales y creando condiciones equivalentes a una alimentación fed-batch (alimentación por lotes) lo cual puede ser ventajoso para mejorar la capacidad de un ASBR para tratar una variedad de tipos de aguas residuales (Cheong & Hansen, 2008).

5. Modelización de la digestión anaerobia

En general, los modelos matemáticos pueden servir como herramientas útiles para profundizar en la comprensión de sistemas complejos, y para facilitar la operación y el diseño del proceso. Si el comportamiento de un sistema se puede predecir, la producción puede optimizarse y, por consiguiente, prevenirse el fracaso del proceso (Lidholm y Ossiansson, 2008).

La modelización de la digestión anaerobia, ha sido ampliamente estudiada en las últimas tres décadas, sin embargo, debido a la complejidad del proceso, ha sido estudiada como un sistema de caja negra¹, por lo que ha sido necesario el desarrollo de un modelo matemático que describa los procesos y así facilitar el diseño, el análisis del sistema, el análisis operativo y de control de una instalación de digestión anaerobia. Es por esto que en los últimos años los investigadores se dieron a la tarea de normalizar y parametrizar la estructura de un modelo genérico de la digestión anaerobia, evitando especificidades de ciertos procesos para hacerlo más utilizable y resultando en uno de los modelos existentes más avanzados y sofisticados, el Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1) desarrollado por la International Water Association (IWA) en 2002 (Bastone et al., 2002).

El modelo ADM1 ha sido utilizado como un modelo de base que permite que los investigadores se centren en modificaciones para fines específicos (Lidholm y Ossiansson, 2008) y ha sido ampliamente aplicado y validado en la simulación de la digestión anaerobia de diversos residuos orgánicos como aguas residuales industriales, lodos de plantas de tratamiento de aguas residuales, los lodos de depuradora, residuos sólidos de almazara, entre otros (Yu et al., 2013).

5.1. Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1)

El modelo ADM1 simula los principales procesos relacionados con la conversión de sustratos orgánicos complejos en CH_4 , CO_2 y subproductos inertes e implica cinéticas de reacción complejas y una multitud de reacciones simultáneas y secuenciales, clasificadas principalmente ya sea bioquímicas o físico-químicas (Yu et al., 2013). El conjunto de reacciones bioquímicas está estructurado por las etapas de desintegración e hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis. La etapa de solubilización extracelular se divide en desintegración e hidrólisis, de las cuales la primera convierte las partículas de sustrato compuesto en materia inerte, carbohidratos particulados, proteínas y lípidos. La segunda es la hidrólisis enzimática la cual

¹ Sistema de caja negra o Black box: que es estudiado desde el punto de vista de las entradas que recibe y las salidas que produce.

convierte los carbohidratos particulados, proteínas y lípidos a monosacáridos, aminoácidos y ácidos grasos de cadena larga (AGCL) respectivamente. La desintegración se incluye principalmente para describir la degradación de material compuesto particulado con características agrupadas, mientras la etapa de hidrólisis para describir sustratos bien definidos, relativamente puros. Todos los procesos de desintegración y de hidrólisis están representados por una cinética de primer orden. Dos grupos separados de agentes acidogénicos degradan monosacáridos y aminoácidos a ácidos orgánicos mixtos, hidrógeno y dióxido de carbono. Los ácidos orgánicos son posteriormente convertidos a acetato, hidrógeno y dióxido de carbono por grupos acetogénicos que utilizan AGCL, butirato y valerato, y propionato. El hidrógeno producido por estos organismos es consumido por un grupo metanogénico hidrogenotrófico, y el acetato por un grupo metanogénico acetotrófico. La lisis de la biomasa está representada por una cinética de primer orden, y la biomasa muerta se mantiene en el sistema como material compuesto particulado (Buffiere et al., 2008).

La cinética de consumo de sustrato de tipo Monod se utiliza para todas las reacciones bioquímicas, ésta cinética es de primer orden respecto a la biomasa X con una constante de reacción de crecimiento, que depende de la concentración de sustrato S según la expresión 5-1 (Moreno, 2014; Buffiere et al., 2008).

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu_{\max}}{Y} \cdot \frac{S}{K_s + S} \cdot X \quad (5-1)$$

Donde μ_{\max} es la tasa máxima de crecimiento (d^{-1}), Y es la tasa de conversión de sustrato en biomasa y K_s es la constante de saturación, que corresponde a la concentración de sustrato para el que la velocidad de crecimiento o de consumo de sustrato es la mitad de la máxima.

Las funciones de inhibición incluyen la de pH para todos los grupos de bacterias, la de hidrógeno para las bacterias metanogénicas y la de amonio para metanógenos acetoclásticos. La inhibición por pH se implementa como ecuaciones empíricas, mientras que la inhibición por hidrógeno y amonio libre están representadas por funciones no competitivas. Las funciones de inhibición siguen la forma de la expresión 5-2. Éstas expresiones de inhibición se utilizan de forma multiplicativa con las expresiones de cinética de consumo de sustrato.

$$\frac{K_{is}}{K_{is} + S} \quad (5-2)$$

Las reacciones físico-químicas son independientes de los microorganismos. Éstas se asume que son controladas por procesos que implican la transferencia de líquido-gas y los que

implican la asociación/disociación de iones. Estos procesos son relativamente más rápidos que los procesos bioquímicos y pueden ser expresada por ecuaciones algebraicas. Los procesos de transferencia de líquido-gas están representadas por ecuaciones de transferencia dinámica de gases basadas en la ley de Henry (Flotats, 2014; Yu et al., 2013)

El modelo no incluye aspectos como la precipitación de sólidos, sistemas de reducción de sulfatos o la oxidación sintrófica de acetato.

El modelo ADM1 considera 19 procesos de cinética bioquímica y 24 variables dinámicas de estado los cuales se enlistan en la tabla 5-1 y 5-2. Debido al gran número de parámetros que intervienen en el modelo, éste presenta notación matricial basada en la matriz de Petersen, lo que le permite sistematizar la expresión matemática del proceso global de digestión anaerobia ya que más de un procesos afecta simultáneamente a más de una de las variables dinámicas de estado que intervienen. La matriz de Petersen es una matriz que tiene tantas columnas como variables de estado que participan y tantas filas como número de procesos que se llevan a cabo, además de una columna donde se indican las tasas de reacción de los procesos bioquímicos (Moreno, 2014).

1	Desintegración	11	Consumo de acetato
2	Hidrólisis de carbohidratos	12	Consumo de hidrógeno
3	Hidrólisis de proteínas	13	Lisis de X_{su}
4	Hidrólisis de lípidos	14	Lisis de X_{aa}
5	Consumo de azúcar	15	Lisis de X_{la}
6	Consumo de aminoácidos	16	Lisis de X_{C4}
7	Consumo de AGCL	17	Lisis de X_{pro}
8	Consumo de valerato	18	Lisis de X_{ac}
9	Consumo de butirato	19	Lisis de X_{h2}
10	Consumo de propionato		

Tabla 5-1. Procesos de la DA considerados en el modelo ADM1.

S_{su}	Monosacáridos	X_c	Compuesto (composite)
S_{aa}	Aminoácidos	X_{ch}	Carbohidratos
S_{ta}	Ácidos grasos de cadena larga (AGCL)	X_{pr}	Proteínas
S_{va}	Valerato total	X_s	Lípidos
S_{bu}	Butirato total	X_{su}	Degradadores de azúcares
S_{pro}	Propionato total	X_{aa}	Degradadores de aminoácidos
S_{ac}	Acetato total	X_{fa}	Degradadores de AGCL
S_{h2}	Hidrógeno gas	X_{c4}	Degradadores de valerato y butirato
S_{ch4}	Metano gas	X_{pro}	Degradadores de propionato
S_{ic}	Carbono inorgánico	X_{ac}	Degradadores de acetato
S_{in}	Nitrógeno inorgánico	X_{h2}	Degradadores de hidrógeno
S_i	Solubles inertes	X_i	Partículas inertes

Tabla 5-2. Variables dinámicas de estado que intervienen en el modelo ADM1.

6. Metodología

6.1. Consideraciones para el desarrollo del simulador

Para el desarrollo del simulador se tomaron en cuenta las siguientes consideraciones:

- El simulador toma en cuenta 5 etapas llevadas a cabo por un reactor ASBR: llenado, reacción, sedimentación, descarga y purga. Las primeras cuatro etapas se llevarán a cabo en cada ciclo simulado mientras que la etapa de purga se llevará a cabo de ser necesario.
- Durante la etapa de llenado se considera que no existe reacción entre el sustrato entrante y el sustrato existente o inoculó en el reactor.
- Ya que no existirá reacción durante la etapa de llenado, se considerará un tiempo de llenado corto con el fin de lograr una mayor actividad al comienzo de cada ciclo en el reactor.
- El tiempo de llenado (t_f), el tiempo de descarga (t_d) y el tiempo de purga (t_p), estarán definidos por el volumen de llenado (V_f), descarga (V_d) y purga (V_p) en conjunto de los caudales de llenado (Q), descarga (Q_d) y purga (Q_p) respectivamente.
- En la etapa de reacción se considera el reactor como un tanque de mezcla completa.
- La duración de la etapa de reacción estará definida por el diferencial diario de la producción acumulada de biogás. Cuando el diferencial llegue a un valor mínimo fijado se considera que la etapa de reacción termina. En este caso se consideró que al llegar a una diferencia en la producción diaria acumulada de biogás igual a 1m^3 se da por terminada la etapa de reacción.
- Durante la etapa de sedimentación no existe reacción en el reactor.
- En la etapa de sedimentación se considera que toda la concentración sólidos en suspensión volátiles (SSV) (DQO particulado) sedimentan a una altura de 50% del reactor, obteniendo un sobrenadante sin concentración de compuestos orgánicos particulados.
- El tiempo de sedimentación se fijará dependiendo del sustrato a utilizar, tomando en cuenta que se desea que los SSV sedimenten a una altura del 50% del reactor.
- Se limitará la concentración de SSV en el fango sedimentado a un valor límite.
- Si el valor de la concentración de SSV al después de la etapa de sedimentación es mayor al valor límite establecido la purga se llevará a cabo.
- El volumen de purga será el mismo que ocupa el excedente de concentración de SS considerando que el valor límite ocupa un 50% del volumen del reactor.

6.2. Desarrollo del simulador

Planteadas las consideraciones anteriores se realizó un simulador de un reactor anaerobio ASBR basado ADM1 (Bastone et al., 2002).

El desarrollo del simulador del reactor ASBR se realizó en MATLAB® con una rutina de funcionamiento como la mostrada en la figura 6-1. Se desarrolló una rutina principal llamada 'ASBR' la cual funciona en conjunto con 6 funciones, 3 de ellas basadas en la programación realizada por Xavier Flotats del modelo ADM1. En la tabla 6-1 se hace una descripción general de los datos de entrada y salida de cada una de las 6 funciones que alimentan la rutina 'ASBR'.

Función	Entradas (Inputs)	Salidas (Outputs)
Inoculum	Caracterización del inóculo en el reactor	Vector de concentraciones del inóculo en el reactor (UA)
Inlet	Caracterización del sustrato a tratar	Vector de concentraciones del sustrato a tratar (UB)
genKK	Parámetros de operación del sistema Constantes cinéticas de todos los procesos del ADM1	Vector de parámetros de operación (KO) Matriz de constantes cinéticas [KK]
FeedS	(UA), (UB), (KO)	Vector de concentraciones al final del tiempo de llenado (UF).
genMM	Coeficientes estequiométricos del modelo ADM1	Matriz de coeficientes estequiométricos [MM]
Reaction	(UF), (KO), [KK], [MM]	Matriz de los diferenciales de concentración de los componentes en el reactor [F]

Tabla 6-1. Descripción general de las entradas y salidas de las funciones que alimentan la rutina principal ASBR.

Debido a que no se consideró reacción durante la etapa de llenado, tampoco se consideró el cálculo de una concentración diferencial del sustrato en el reactor durante esta etapa. Por lo anterior en la función 'FeedS' se consideró un balance de masas en el tiempo final de la etapa de llenado.

$$UF = \frac{(UA \cdot Vr) + (UB \cdot Q \cdot t_f)}{VI}$$

Donde:

UF= Concentración al final de la etapa de llenado (Kg DQO/m³)

UA= Concentración del inóculo en el reactor (Kg DQO/m³)

UB= Concentración del sustrato a tratar (Kg DQO/m³)

Vr= Volumen de inóculo o sustrato inicial en el reactor (m³)

VI= Volumen de total de líquido en el reactor (m³)

Q= Caudal de alimentación o llenado del reactor (m³/d)

t_f= Duración de la etapa de llenado (d)

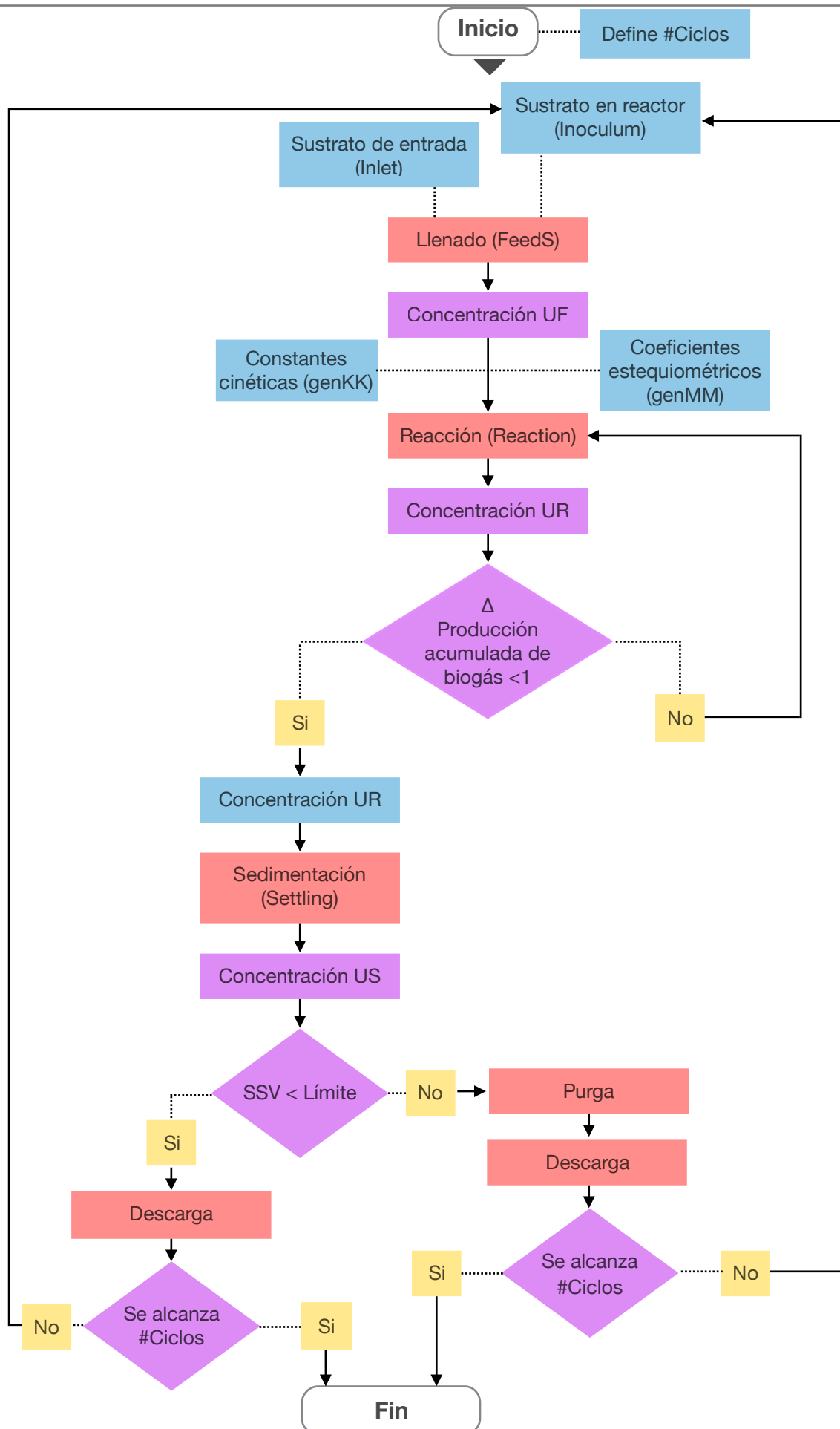


Figura 6-1. Diagrama de funcionamiento del simulador de un ASBR.

Para el funcionamiento de la rutina ASBR fue necesario definir los parámetros mostrados en la tabla 6-2 y así obtener los resultados del comportamiento de un reactor ASBR.

Entrada	Descripción	
Cy	Número de ciclos de funcionamiento del reactor	Rango de números enteros positivos [1:2]
TSPAN	Límites de integración de los diferenciales de concentración generados en la función 'Reaction'. Es el tiempo en que se llevará a cabo la digestión anaerobia	Rango de números positivos [1:1:100]
LBP	Define el diferencial de producción acumulada de biogás al cual se detendrá la etapa de reacción	Valor en m ³
SSV	Concentración límite de SSV para que no haya purga	Valor en Kg DQO / m ³

Tabla 6-2. Descripción de parámetros de entrada en la rutina ASBR.

De la rutina ASBR se obtienen las matrices A y B, la primera de ellas muestra el comportamiento del sustrato en el reactor durante la duración de la etapa de reacción mientras que la segunda nos arrojará datos generales de cada ciclo de uso del reactor. En las tablas 6-3 y 6-4 se describen los datos de salida de la rutina ASBR.

Salida	Descripción	Unidades
A(1:TR,1)	Relación F/M	Kg DQO / Kg SSV
A(1:TR, 2:36)	Matriz de concentraciones del sustrato en el tiempo	Kg DQO/m ³
A(1:TR,39)	pH	
A(1:TR,41)	Producción diaria de biogás	m ³ / d
A(1:TR,44)	Producción acumulada de biogás	m ³
A(1:TR,47)	Porcentaje de CH ₄ en el biogás	% CH ₄
A(1:TR,57)	Concentración de DQO biodegradable	Kg DQO/m ³
A(1:TR,58)	Presión parcial de H ₂	bar

Tabla 6-3. Descripción de datos de la matriz A generada por la rutina 'ASBR'.

Salida	Descripción	Unidades
B(Cy,1)	Número de ciclo	-
B(Cy,2:5)	Tiempo de llenado, Tiempo de sedimentación, Tiempo de purga y Tiempo de descarga	d
B(Cy,6)	Duración del ciclo	d
B(Cy,7)	Tiempo de reacción	d
B(Cy,8)	Producción acumulada de biogás al final del ciclo	m ³ /ciclo
B(Cy,9)	Porcentaje de eliminación de DQO biodegradable	%
B(Cy,10)	Concentración de SSV después de la sedimentación	Kg DQO/m ³

Tabla 6-4. Descripción de datos de la matriz B generada por la rutina 'ASBR'.

Parámetro		Unidades	Valor
T	Temperatura	°C	35
Vg	Volumen de gas	m³	10
VI	Volumen húmedo	m³	20
Vf	Volumen de llenado	m³	0.5*VI
Vr	Volumen de inóculo en reactor	m³	0.5*VI
Q	Caudal de llenado	m³/d	
Qd	Caudal de descarga	m³/d	
Qp	Caudal de purga	m³/d	

Tabla 6-5. Parámetros de operación utilizados para la simulación de un ASBR.

6.3. Tipología del sustrato

La comparación directa de la producción de biogás a partir de diferentes materias primas o residuos es difícil, ya que los datos de rendimiento para sustratos específicos se producen a menudo bajo una amplia variedad de condiciones experimentales (por ejemplo, el régimen de mezcla, la temperatura, sólidos totales, sólidos volátiles, y el tiempo de retención hidráulica). Por

esta razón, es mejor comparar materias primas por su rendimiento final de metano (B_0), determinado por el ensayo potencial bioquímico de metano (Ward et al., 2008).

Los purines de animal son una fuente abundante de materia orgánica para utilizarse como materia prima en digestores anaerobios. La digestión anaerobia de purines de animal se utiliza principalmente para reducir los olores en los sistemas de gestión de residuos, para reducir la carga orgánica de un flujo de residuos, y producir biogás rico en energía. La captura y utilización del metano (CH_4) en biogás también reduce los gases de invernadero y en algunos casos se puede utilizar para generar bonos de carbono negociables (Moody et al., 2009). Sin embargo, este tipo de residuos presenta concentraciones de amonio mayores que la necesaria para el crecimiento microbiano lo cual puede resultar en una inhibición del proceso de digestión anaerobia (Ward et al., 2008).

Algunos resultados del ensayo de potencial bioquímico de metano para purines muestran que el potencial de metano (B_0) varía ampliamente entre los tipos de ganado. Los factores que contribuyen al potencial de metano de los purines son la especie, raza y etapa de crecimiento de los animales, cantidad y tipo de alimentación y también todos los procesos de degradación que pueden tener lugar durante el almacenamiento (Ward et al., 2008). Según el manual de referencia del IPCC (1996) los purines de ganado que presenta mayor potencial de metano es el de ganado porcino como se puede ver en la tabla 6-6.

	B_0 en Países desarrollados	B_0 en Países en desarrollo
Ganado no lechero	0.17	0.10
Ganado lechero	0.24	0.13
Aves	0.32	0.24
Ganado porcino	0.45	0.29

Tabla 6-6. Rango de valores de potencial de metano (B_0) para purines de ganado en ($m^3 CH_4/kg$ SV) (IPCC, 1996).

Dado que los purines de cerdo (ganado porcino) presenta un alto potencial de metano así como una alta concentración de amonio, se ha elegido como el sustrato a tratar dentro del reactor ASBR.

Antes de hacer uso del simulador es necesario determinar el fraccionamiento y caracterización del afluente de acuerdo a las características del ADM1. Para fines de este trabajo, se ha utilizado el fraccionamiento y caracterización de purines de cerdo (Tablas 6-7 y 6-8)

realizado por Girault et al. (2012) mediante el método de respirometría anaerobia la cual consiste en la identificación de las fracciones de DQO y los parámetros cinéticos asociados a la degradación del sustrato en base a la interpretación de las curvas de tasa de producción de metano (MPR) obtenidas durante la degradación anaerobia del sustrato en experimentos por lotes.

Parámetro	Valor	Unidades
pH	7.8	
ST	73.4 ± 0.4	g/Kg
SV	53.4 ± 0.4	g/Kg
DQO _{total}	95.2	Kg O ₂ /m ³
DQO _{soluble}	34.81 ± 0.7	Kg O ₂ /m ³
TKN	5.67 ± 0.1	g N/kg
NI	0.275	Kmol N/m ³
CI	0.429 ¹	Kmol C/m ³
k _{hyd}	0.37	d ⁻¹

Tabla 6-7. Características y fracción bioquímica de purines de cerdo. Adaptado de Girault et al. (2012)

¹ Bonmatí, 2001

	Substrato	
	%DQO _{total}	Kg O ₂ /m ³
S _{ac}	6.8	6.47
S _{pro}	2.2	2.09
S _{bu}	2.1	2.00
S _{va}	3.0	2.86
X _i	44.6	42.46
X _{pr}	1.8	1.71
X _{ch}	9.8	9.33
X _{li}	3.3	3.14
S _{aa}	3.2	3.05
S _{su}	17.4	16.56
S _{fa}	5.8	5.52

Tabla 6-8. Porcentajes de fraccionamiento del sustrato con respecto a la DQO_{total}. Adaptado de Girault et al. (2012)

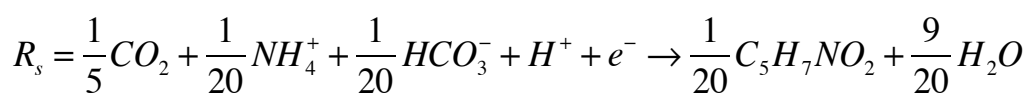
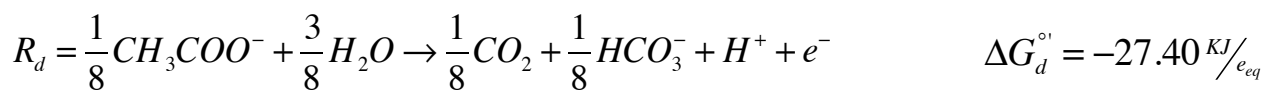
6.4. Dinámica de las bacterias SAO en ADM1

La utilización de un sustrato con alto contenido de amonio como lo son los purines de cerdo es parte del objetivo general de este trabajo. Como se mencionó en el apartado 2, las altas concentraciones de nitrógeno amoniacal generan inhibiciones en las poblaciones de bacterias metanogénicas, lo que reduce el rendimiento de la digestión anaerobia. Esta inhibición en ocasiones puede ser superada si se dan las condiciones para el crecimiento de poblaciones sintróficas acetato-oxidantes. Es por esto que en el presente trabajo se hace una adaptación al modelo ADM1 para agregar la dinámica de la población de bacterias SAO en la digestión anaerobia.

Para realizar la adaptación del modelo ADM1, fue necesario identificar los procesos llevados a cabo por las bacterias SAO dentro de la digestión anaerobia: consumo de acetato para la producción de H_2 y CO_2 , lisis de las bacterias SAO y el consumo de H_2 para la formación de acetato, proceso 20, proceso 21 y proceso 22 respectivamente. Estos tres procesos así como una componente de concentración de la población de las bacterias SAO llamada X_{sao} , se añadieron a los 19 procesos existentes del modelo ADM1 y a las 24 variables de estado del mismo como se muestra en las tablas 6-9 y 6-10. Así mismo se plantearon las ecuaciones de velocidades de reacción para cada uno de los procesos nuevos, mostradas en la tabla 6-11.

Una vez identificados los procesos fue necesario determinar la estequiometría de la reacción global (R) que representa los procesos 20 y 22, para esto fue necesario encontrar las semireacciones tanto donadora (R_d) como aceptadora (R_a) de electrones así como la semireacción de síntesis (R_s).

Semireacciones del Proceso 20 obtenidas de Rittmann & McCarty (2001):



Componente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Proceso	S _{ms}	S _{aa}	S _{ag}	S _{val}	S _{bu}	S _{pro}	S _{ac}	S _{h2}	S _{ch4}	S _{Cl}	S _{NI}	S _I
1												$f_{si,xc}$
2	1											
3		1										
4	$1 - f_{ms,li}$		$f_{ag,li}$									
5	-1				$(1 - Y_{ms})f_{bu,ms}$	$(1 - Y_{ms})f_{pro,ms}$	$(1 - Y_{ms})f_{ac,ms}$	$(1 - Y_{ms})f_{h2,ms}$		$-\sum C_i \gamma_{i,5}$	$-Y_{ms} \cdot N_b$	
6		-1		$(1 - Y_{aa})f_{val,aa}$	$(1 - Y_{aa})f_{bu,aa}$	$(1 - Y_{aa})f_{pro,aa}$	$(1 - Y_{aa})f_{ac,aa}$	$(1 - Y_{aa})f_{h2,aa}$		$-\sum C_i \gamma_{i,6}$	$N_{aa} - Y_{aa} \cdot N_b$	
7			-1				$(1 - Y_{ag}) \cdot 0.7$	$(1 - Y_{ag}) \cdot 0.3$			$-Y_{ag} \cdot N_b$	
8				-1		$(1 - Y_{val}) \cdot 0.54$	$(1 - Y_{val}) \cdot 0.31$	$(1 - Y_{val}) \cdot 0.15$			$-Y_{val} \cdot N_b$	
9					-1		$(1 - Y_{bu}) \cdot 0.8$	$(1 - Y_{bu}) \cdot 0.2$			$-Y_{bu} \cdot N_b$	
10						-1	$(1 - Y_{pro}) \cdot 0.57$	$(1 - Y_{pro}) \cdot 0.43$		$-\sum C_i \gamma_{i,10}$	$-Y_{pro} \cdot N_b$	
11							-1		$(1 - Y_{ac})$	$-\sum C_i \gamma_{i,11}$	$-Y_{ac} \cdot N_b$	
12								-1	$(1 - Y_{h2})$	$-\sum C_i \gamma_{i,12}$	$-Y_{h2} \cdot N_b$	
13												
14												
15												
16												
17												
18												
19												
20							-1	$1 - Y_{sao1}$		$-\sum C_i \gamma_{i,20}$	$-Y_{sao1} \cdot N_b$	
21												
22							$1 - Y_{sao2}$	-1		$-\sum C_i \gamma_{i,22}$	$-Y_{sao2} \cdot N_b$	

Tabla 6-9. Coeficientes de reacción bioquímica y ecuaciones cinéticas de compuestos solubles. Adaptado de (Bastone et al., 2002).

Componente	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25
Proceso	X_c	X_{ch}	X_{pr}	X_{li}	X_{ms}	X_{aa}	X_{ag}	X_{c4+}	X_{pro}	X_{ac}	X_{h2}	X_{sao}	X_I
1	-1	$f_{ch,xc}$	$f_{pr,xc}$	$f_{li,xc}$									$f_{xi,xc}$
2		-1											
3			-1										
4				-1									
5					Y_{ms}								
6						Y_{aa}							
7							Y_{ag}						
8								Y_{c4+}					
9								Y_{c4+}					
10									Y_{pro}				
11										Y_{ac}			
12											Y_{h2}		
13	1				-1								
14	1					-1							
15	1						-1						
16	1							-1					
17	1								-1				
18	1									-1			
19	1										-1		
20												Y_{sao1}	
21	1											-1	
22												Y_{sao2}	

Tabla 6-10. Coeficientes de reacción bioquímica y ecuaciones cinéticas de compuestos particulados. Adaptado de (Bastone et al., 2002).

Proceso	Velocidades de reacción
1	$K_{dis} \cdot X_C$
2	$K_{hyd.ch} \cdot X_{ch}$
3	$K_{hyd.pr} \cdot X_{pr}$
4	$K_{hyd.li} \cdot X_{li}$
5	$K_{m.su} \cdot \frac{S_{su}}{S_{su} + K_s} \cdot \frac{S_N}{S_N + K_{sN}} \cdot I_{pH} \cdot X_{su}$
6	$K_{m.aa} \cdot \frac{S_{aa}}{S_{aa} + K_s} \cdot \frac{S_N}{S_N + K_{sN}} \cdot I_{pH} \cdot X_{aa}$
7	$K_{m.fa} \cdot \frac{S_{fa}}{S_{fa} + K_s} \cdot \frac{K_{I_{H2}}}{K_{I_{H2}} + S_{H2}} \cdot \frac{S_N}{S_N + K_{sN}} \cdot I_{pH} \cdot X_{fa}$
8	$K_{m.c4} \cdot \frac{S_{va}}{S_{va} + K_s} \cdot \frac{K_{I_{H2}}}{K_{I_{H2}} + S_{H2}} \cdot \frac{S_N}{S_N + K_{sN}} \cdot \frac{S_{va}}{S_{va} + S_{bu}} \cdot I_{pH} \cdot X_{c4}$
9	$K_{m.c4} \cdot \frac{S_{bu}}{S_{bu} + K_s} \cdot \frac{K_{I_{H2}}}{K_{I_{H2}} + S_{H2}} \cdot \frac{S_N}{S_N + K_{sN}} \cdot \frac{S_{bu}}{S_{va} + S_{bu}} \cdot I_{pH} \cdot X_{c4}$
10	$K_{m.pro} \cdot \frac{S_{pro}}{S_{pro} + K_s} \cdot \frac{K_{I_{H2}}}{K_{I_{H2}} + S_{H2}} \cdot \frac{S_N}{S_N + K_{sN}} \cdot I_{pH} \cdot X_{pro}$
11	$K_{m.ac} \cdot \frac{S_{ac}}{S_{ac} + K_s} \cdot \frac{K_{I_{NH3}}}{K_{I_{NH3}} + NH_3} \cdot \frac{S_N}{S_N + K_{sN}} \cdot I_{pH} \cdot X_{ac}$
12	$K_{m.H2} \cdot \frac{S_{H2}}{S_{H2} + K_s} \cdot \frac{S_N}{S_N + K_{sN}} \cdot I_{pH} \cdot X_{H2}$
13	$K_{d.su} \cdot X_{su}$
14	$K_{d.aa} \cdot X_{aa}$
15	$K_{d.fa} \cdot X_{fa}$
16	$K_{d.c4} \cdot X_{c4}$
17	$K_{d.pro} \cdot X_{pro}$
18	$K_{d.ac} \cdot X_{ac}$
19	$K_{d.h2} \cdot X_{h2}$
20	$K_{m.sao1} \cdot \frac{S_{ac}}{S_{ac} + K_s} \cdot \frac{K_{I_{H2}}}{K_{I_{H2}} + S_{H2}} \cdot \frac{S_N}{S_N + K_{sN}} \cdot I_{pH} \cdot X_{sao}$
21	$K_{d.sao} \cdot X_{sao}$
22	$K_{m.sao2} \cdot \frac{S_{H2}}{S_{H2} + K_s} \cdot \frac{S_N}{S_N + K_{sN}} \cdot I_{pH} \cdot X_{sao}$

Tabla 6-11. Velocidades de reacción para los procesos del ADM1 considerando los procesos de las bacterias SAO. Adaptado de (Bastone et al., 2002).

Con los valores de la energía libre de Gibbs de las semireacciones se introdujeron a la ecuación (6-1) para determinar la energía libre de Gibbs de la reacción en condiciones estándar (ΔG_r°).

$$\Delta G_r^\circ = \Delta G_a^\circ - \Delta G_d^\circ \quad (6-1)$$

$$\Delta G_r^\circ = 39.87 - 27.40 = 12.47 \text{ KJ} / e_{eq}$$

Con la ecuación (6-2) se calculó el parámetro energético que representa la conversión del donador de electrones a un compuesto intermedio (ΔG_p°) y, mediante la ecuación (6-3), el parámetro energético que representa la conversión del compuesto intermedio a biomasa celular (ΔG_{pc}°), en esta última se asumió una composición celular $C_5H_7NO_2$ y que el amonio es la fuente de nitrógeno.

$$\Delta G_p^\circ = 35.07 - \Delta G_d^\circ \quad (6-2)$$

$$\Delta G_p^\circ = 35.07 - 27.40 = 7.69 \text{ KJ} / e_{eq}$$

$$\Delta G_{pc}^\circ = 3.33 \left(\frac{113}{20} \right) = 18.81 \text{ KJ} / e_{eq} \quad (6-3)$$

Mediante la formula (6-4) y con los parámetros energéticos antes mencionados, se estimó la cantidad de donador de electrones que se requiere oxidar para conseguir la energía para sintetizar un electrón equivalente (A). Para la estimación de este parámetro se utilizó un valor de eficiencia de transmisión de electrones (ϵ) de 60% obtenido de un rango propuesto por (Rittmann & McCarty, 2001). El valor de n en la fórmula depende si el valor de (ΔG_p°) es positivo y negativo, en caso que sea positivo la energía es utilizada para transformar la fuente de carbono celular en el compuesto intermedio y n toma un valor de 1. En cambio si es negativo, la energía es obtenida a partir de la conversión a sí mismo y n toma un valor de -1.

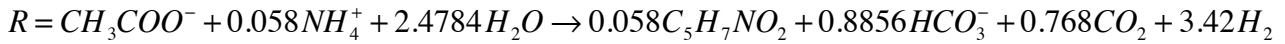
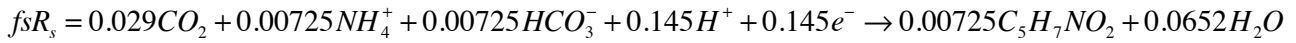
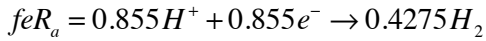
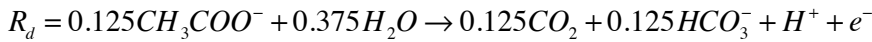
$$A = \frac{\frac{\Delta G_p^\circ}{\epsilon^n} + \frac{\Delta G_{pc}^\circ}{\epsilon}}{\epsilon \Delta G_r^\circ} = \frac{\frac{7.69}{0.60} + \frac{18.81}{0.60}}{(0.60)(12.47)} = 5.9 \quad (6-4)$$

Con la ecuación (6-5) se determinó la fracción de electrones equivalentes utilizada en la síntesis de biomasa celular (fs) y, a partir de este último, se determinó la fracción de electrones equivalentes utilizados como energía con la ecuación (6-6).

$$fs = \frac{1}{1 + A} = \frac{1}{1 + 5.90} = 0.145 \quad (6-5)$$

$$fe = 1 - fs = 1 - 0.145 = 0.855 \quad (6-6)$$

Mediante las fracciones de electrones equivalentes f_s y f_e se determinó la reacción global del proceso (R).



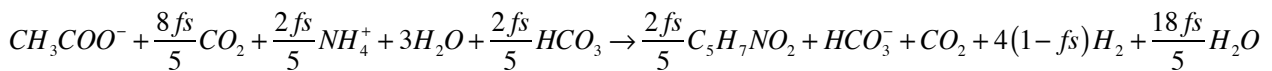
Con los coeficientes estequiométricos de la reacción global se determinó el rendimiento del crecimiento de biomasa para el proceso.

$$Y = \frac{0.00725 \text{ molSSV}}{0.125 \text{ molAc}} \frac{113 \text{ gSSV}}{1 \text{ molSSV}} \frac{1.42 \text{ gDQO}}{\text{gSSV}} \frac{1 \text{ molAc}}{8 e_{eq}} \frac{1 e_{eq}}{8 \text{ gDQO}} = 0.145 \frac{\text{gDQO}}{\text{gDQO}}$$

Para confirmar lo anterior se contrastó con la bibliografía, en donde se encontró qué para el proceso de consumo de acetato y producción de hidrógeno (proceso 20), las bacterias SAO del tipo *Thermacetogenium phaeum strain PB*, presentan un rendimiento del crecimiento $Y = 2.4$ gSSV por mol de acetato (Hattori et al., 2005). Para presentar lo anterior en unidades de DQO se realizó el siguiente cálculo:

$$Y = \frac{2.4 \text{ gSSV}}{1 \text{ molAc}} \frac{1 \text{ molAc}}{64 \text{ gDQO}} \frac{1.42 \text{ gDQO}}{1 \text{ gSSV}} = 0.0532 \frac{\text{gDQO} - \text{SSV}}{\text{gDQO} - \text{Ac}}$$

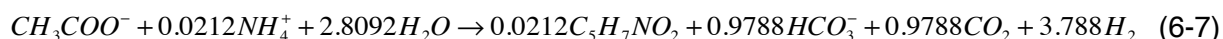
Con el valor de Y de la bibliografía se determinó un nuevo valor de f_s para lo cual fue necesario obtener la reacción global del proceso en función de f_s sumando R_d , $f_e R_a$ y $f_s R_s$. y utilizar los coeficientes estequiométricos en función de f_s .



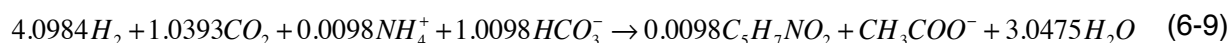
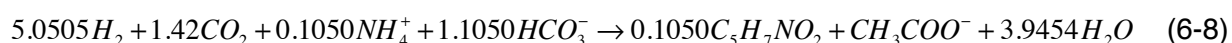
$$Y = \frac{\frac{2f_s}{5}C_5H_7NO_2}{CH_3COO^-} = 0.0532 \frac{\text{gDQO} - \text{SSV}}{\text{gDQO} - \text{Ac}}$$

$$f_s = \frac{\left(0.0532 \frac{\text{gDQO} - \text{SSV}}{\text{gDQO} - \text{Ac}}\right)(1 \text{ mol} - \text{Ac})\left(64 \frac{\text{gDQO} - \text{Ac}}{\text{mol} - \text{Ac}}\right)}{\left(\frac{2}{5} \text{ mol} - \text{SSV}\right)\left(160.46 \frac{\text{gDQO} - \text{SSV}}{\text{mol} - \text{SSV}}\right)} = 0.053$$

Y por último se obtuvo una nueva reacción global del proceso (6-7).



Para el proceso 22 se obtuvo la reacción global mostrada en la expresión (6-8) y rendimiento de crecimiento de biomasa $Y = 0.208 \text{ gDQO} / \text{gDQO}$ (Cálculo completo en Anexos). Lee & Zinder (1998) encontraron que en éste proceso es llevado a cabo por las bacterias SAO del tipo *AOR* las cuales presentan un rendimiento de crecimiento de $Y = 0.024 \text{ gDQO} / \text{gDQO}$. Con este último rendimiento Y se determinó una nueva reacción global para el proceso (6-9).



Al observar las reacciones globales de ambos procesos, se encontró que, si bien no son idénticamente inversas, los reactivos del proceso 20 (acetato y H_2O) se encuentran también dentro de los productos del proceso 22, y los productos del proceso 20 (H_2 , HCO_3 y CO_2) se encuentran dentro de los reactivos del proceso 22 en magnitudes similares.

En el proceso 20 donde hay consumo de acetato y producción de hidrógeno, se observa que en ambas reacciones, tanto en la analítica como en la obtenida de bibliografía, la producción de hidrógeno tiene una magnitud similar cercana a los 4 moles por cada mol de acetato consumido. En el segundo proceso, inverso al antes mencionado, se observa que en la reacción propuesta se requieren 5 moles de hidrógeno para producir un mol de acetato, mientras que en la reacción obtenida con el rendimiento de la bibliografía se tiene un consumo de 4 hidrógenos por mol de acetato formado. Con lo anterior encontramos que con los rendimientos obtenidos de la bibliografía, la relación consumo-producción de sustrato, ya sea H_2 o Acetato, se acercan al valor 4:1, encontrado por Lee & Zinder (1998). Por lo anterior se ha decidido continuar trabajando con los valores de rendimiento obtenidos en la bibliografía así como con las reacciones globales obtenidas a partir de estos valores (expresiones 6-7 y 6-9).

Una vez determinadas las reacciones globales de los procesos 20 y 22, se determinaron los coeficientes estequiométricos del carbono inorgánico (CI) y del nitrógeno inorgánico (NI) mediante el procedimiento mostrado en el apartado de anexos y obteniendo los valores mostrados en la tabla 6-12.

	Proceso 20	Proceso 22
CI (kmol/kgDQO)	3.058×10^{-2}	-3.125×10^{-2}
NI (kmol/kgDQO)	-3.3125×10^{-4}	-1.5×10^{-4}

Tabla 6-12. Coeficientes de estequiométricos del carbón inorgánico y nitrógeno inorgánico.

Los valores de rendimiento de la biomasa así como las constantes de equilibrio de CI y NI se introdujeron en la matriz de coeficientes estequiométricos [MM] dentro de la función genMM del simulador.

Para determinar los valores de la tasa máxima de consumo de sustrato (K_m) para las bacterias SAO, se utilizó el procedimiento de Bergland et al. (2011) y se obtuvieron los valores mostrados en la tabla 6-13 para cada sustrato. Dichos valores se introdujeron dentro de la función genKK del simulador.

	Acetato	Hidrógeno
k_m (KgDQO/KgDQO-d)	5.5	56.81

Tabla 6-13. Valores de tasa máxima de consumo de sustrato (k_m) para bacterias SAO.

7. Resultados + Discusión

Se realizaron tres simulaciones para la representación del comportamiento de un reactor ASBR en el tratamiento de purines de cerdo limitando la etapa de reacción con un valor de diferencial de producción acumulada de biogás de 1 m³, y la existencia de la etapa purga a concentraciones de sólidos en suspensión volátiles (SSV) al final de cada ciclo de 200, 300 y 400 kg DQO/ m³ (unidades en kg de DQO particulado).

Con los resultados obtenidos se observó que las tres simulaciones presentan un comportamiento similar en cada uno de los ciclos. En la figura 7-1 se muestra el comportamiento en la producción acumulada de biogás para cada una de las concentraciones límite en donde se ve con claridad que al ir subiendo la concentración límite de SSV, el número de ciclos necesarios para alcanzar la estabilidad en el reactor ASBR es mayor, la duración de la etapa de reacción aumenta así como la producción de biogás. Se observa que con la concentración límite de SSV de 200 kg DQO/m³ se alcanza un comportamiento estable en el reactor después de ciclos 7 mientras que con una mayor concentración de SSV de 400 kg DQO/m³ la estabilidad se alcanza después de 11 ciclos de funcionamiento del reactor. La estabilidad se alcanza obteniendo tiempos de reacción de entre 23-24 días para la concentración límite más pequeña, mientras que las concentraciones subsecuentes se alcanzan tiempos de reacción de 25 y 26 días respectivamente. Así mismo el comportamiento en la producción acumulada de biogás es proporcional a las concentraciones límite de SSV en el reactor y al tiempo de reacción en el reactor mostrando producciones acumuladas de biogás el momento de la estabilidad de 142, 146 y 148 m³ para cada una de las concentraciones de SSV límites de menor a mayor respectivamente. El porcentaje de CH₄ en el biogás mantiene el mismo comportamiento en las tres simulaciones y el pH mantiene un comportamiento similar en los tres casos manteniéndose siempre cerca de la neutralidad.

SSV	200 Kg DQO / m ³	300 Kg DQO / m ³	400 Kg DQO / m ³	Unidades
Ciclo de estabilidad	7	9	11	ciclos
Tiempo de reacción	23 - 24	25	26	d
TRH	24-25	26	27	d
Producción de biogás	142 - 144	146	148	m ³ biogás/ ciclo
CH ₄	52 - 54	52 - 54	52 - 54	%
pH	7 - 7.8	7.3 - 7.9	7.4 - 7.9	-

Tabla 7-1. Resultados de la simulación del funcionamiento de un reactor ASBR para el tratamiento de purines de cerdo.

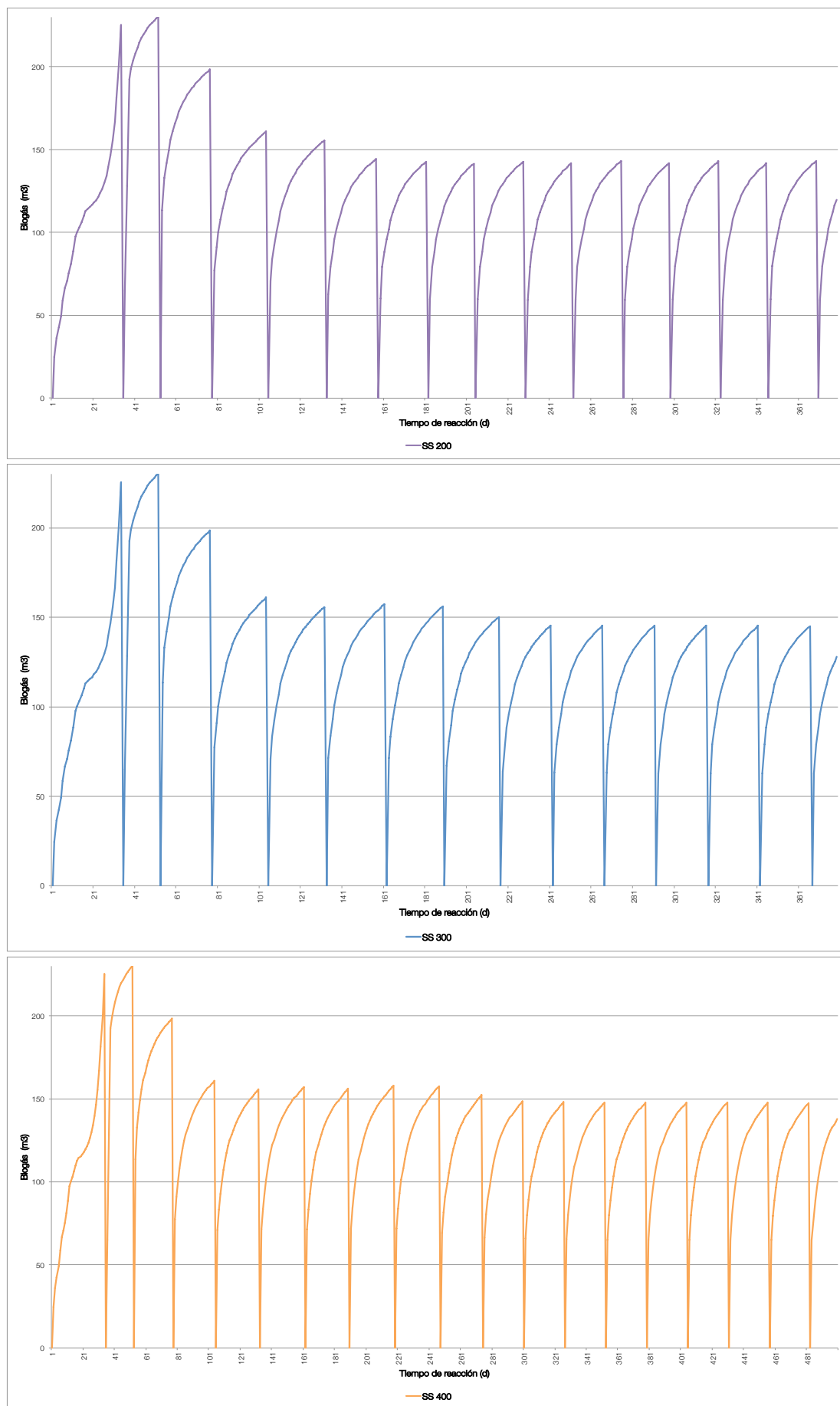


Figura 7-1. Comportamiento de la producción acumulada de biogás (m³) en un reactor ASBR.

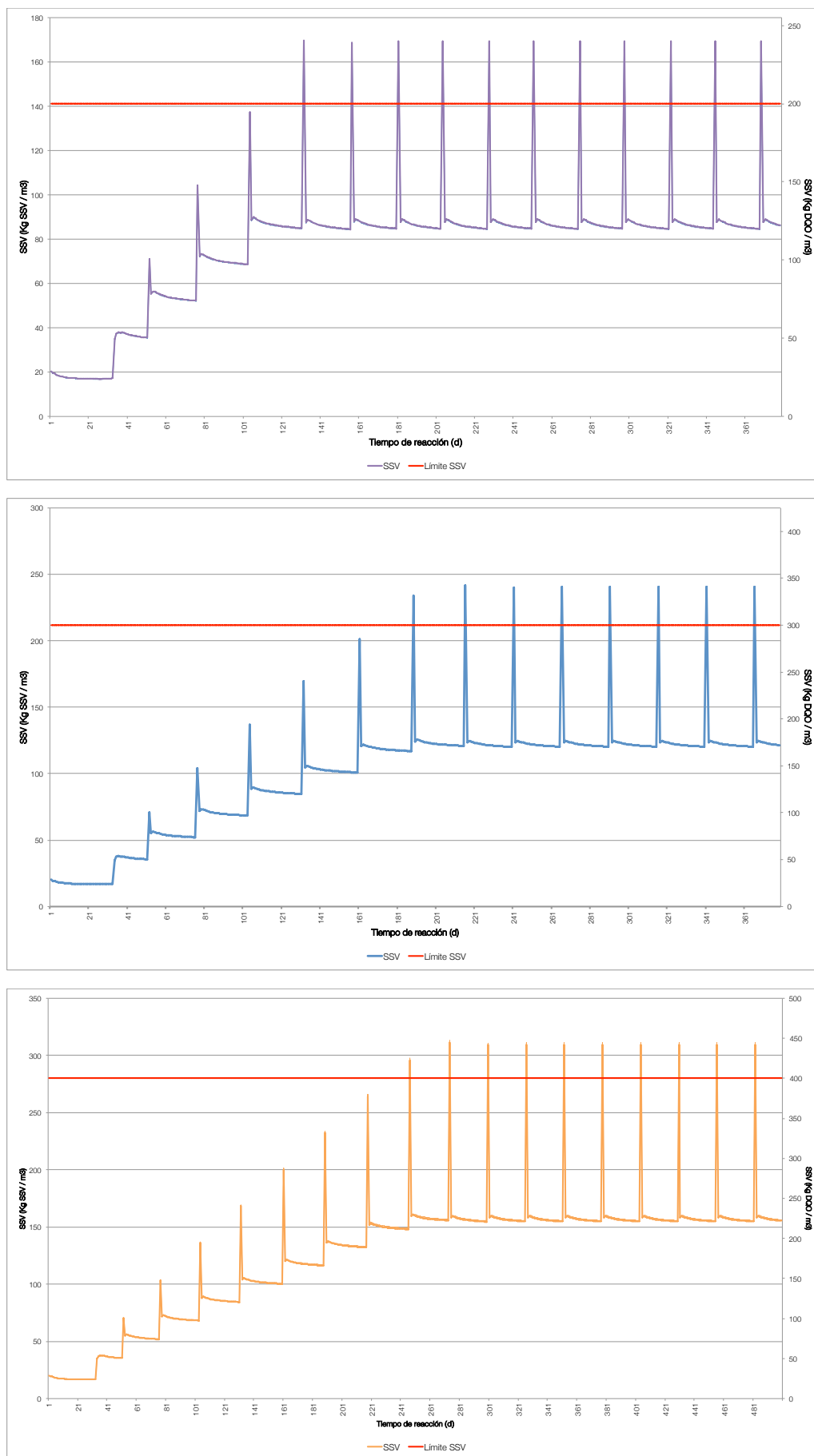


Figura 7-2. Comportamiento de los sólidos en suspensión volátiles (SSV) en el reactor.

En la figura 7-2 se muestra el comportamiento de los SSV donde se marca una recta que indica la concentración límite en el reactor. Alcanzada esta concentración es que se comienza a realizar la purga en el reactor. En las tres simulaciones se obtuvieron tiempo de retención hidráulica (TRH) de 24-25 días para la menor concentración de SSV y 26 y 27 días para las concentraciones límite de SSV subsecuentes y tiempos de retención de sólidos (TRS) de 127, 190 y 258 días respectivamente en el periodo cuasi estacionario. En Cheong & Hansen (2008) se muestra que para el tratamiento de agua residual sintética con DQO máximo de 30 kg DQO/m³, utilizando un reactor ASBR y fijando TRH en 1.25, 2 y 5 se obtienen TRS entre 45-68 días. Con lo anterior no se puede realizar una comparación directa, pero nos da una idea del comportamiento que llega a tener un reactor ASBR, dejando en claro la posibilidad de mantener TRH diferentes a los TRS y resaltando una de las ventajas de los reactores ASBR con respecto a los reactores continuos como los CSTR (Continuos Stirred Tank Reactor).

En la figura 7-3 se muestra el comportamiento de la producción diaria de biogás en el reactor, se puede observar que en el periodo de aclimatación del reactor existe mucha fluctuación en la producción de biogás. Sin embargo, a partir del segundo ciclo, la producción de biogás muestra un comportamiento más estable presentando picos de producción de biogás al comienzo de cada ciclo con un contenido de CH₄ entre el 53 y 65%.

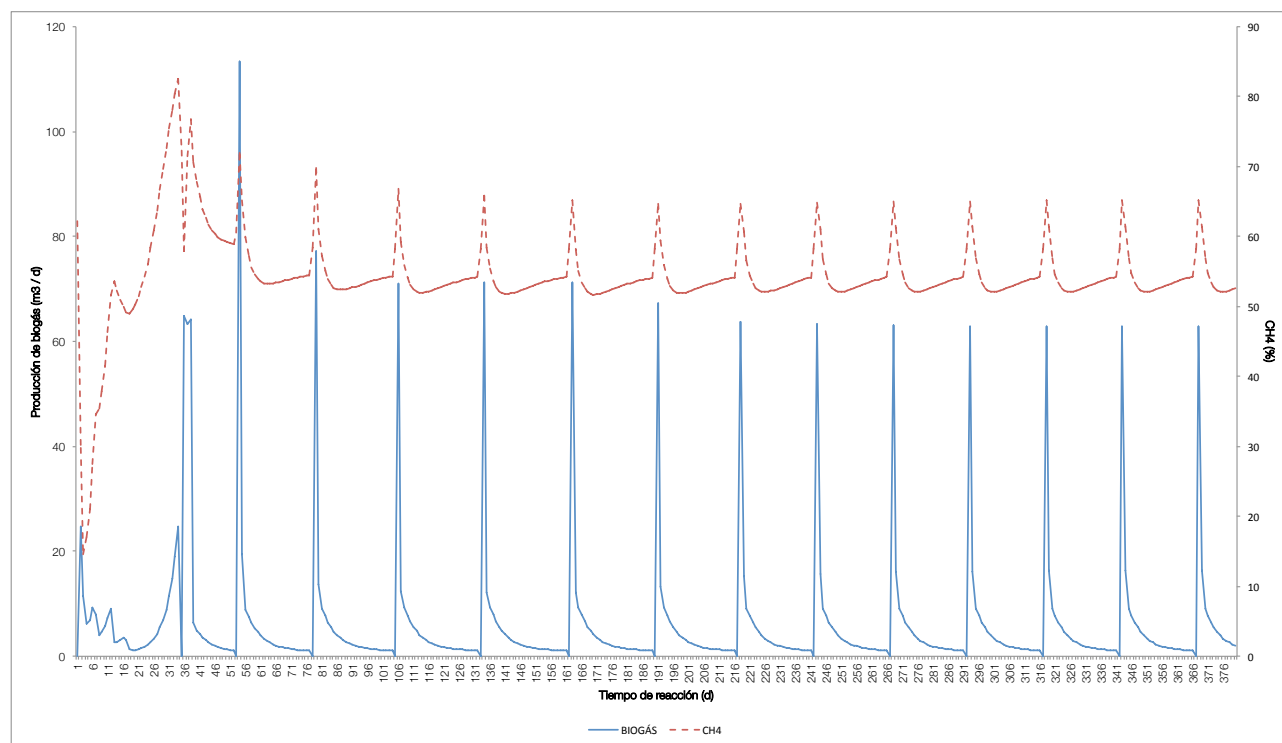


Figura 7-3. Comportamiento de las producción diaria de biogás y su calidad respecto al porcentaje de CH₄.

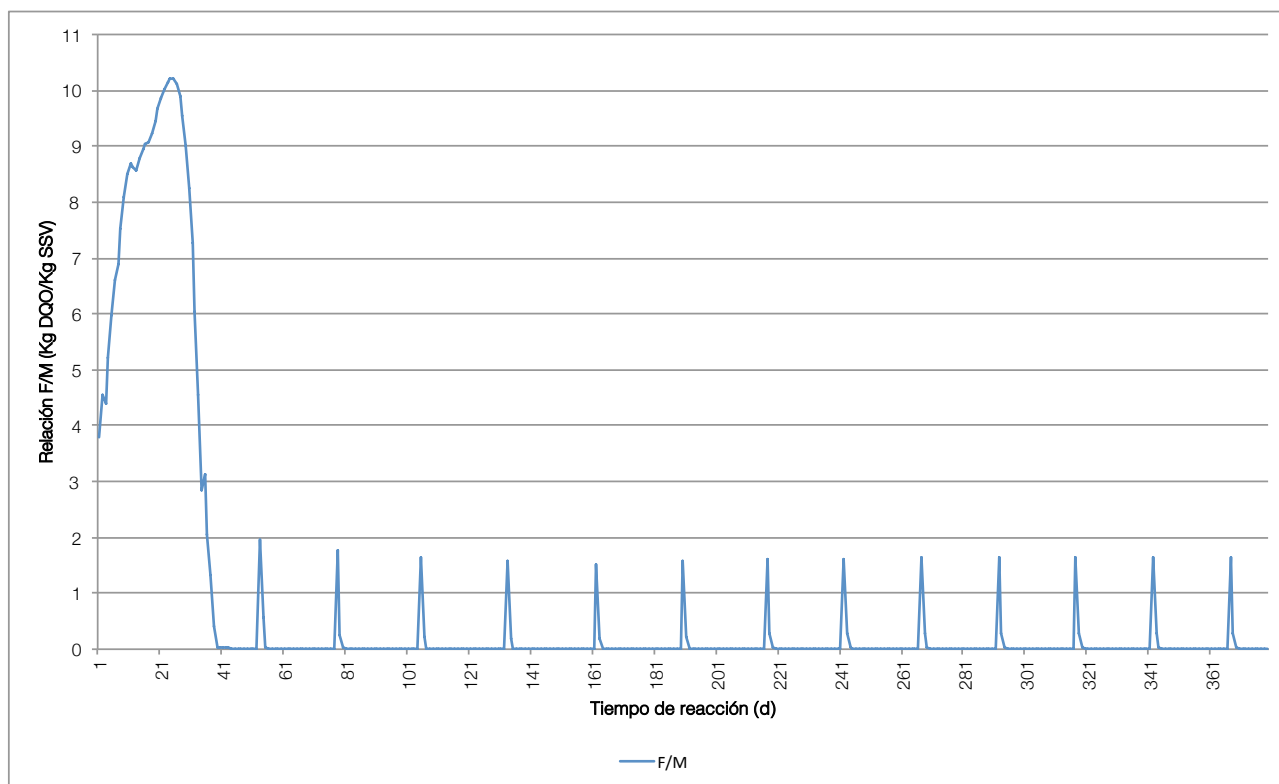


Figura 7-4. Comportamiento de la relación alimento - microorganismos (F/M) en el reactor ASBR.

Los picos de producción de biogás al comienzo de cada ciclo se ven justificados debido a los valores altos en la relación F/M que rondan en los 1.65 kg DQO/ kg SSV (Figura 7-4) lo que significa que al comienzo de cada ciclo hay altas tasas iniciales de eliminación de sustrato, mayor actividad bacteriana y una mayor producción de biogás como se menciona en Ndegwa et al. (2005).

Bastone et al., (2004) y Massé et al., (1996) muestran un comportamiento similar en la producción diaria de biogás mediante el uso de un reactor ASBR para la estimación de parámetros en la modelación de la digestión anaerobia.

En la figura 7-5 se muestra el periodo de aclimatación del reactor ASBR, en este periodo se puede observar el comportamiento de los ácidos grasos volátiles (AGV) donde existe un rápido y gran aumento en sus concentraciones siendo más notable en el butirato (S_{bu}) que va de 1 kg a 2.6 kg DQO/m³ al tercer día y el propionato de 1.05 a 4.60 kg DQO/m³ en el sexto día. Lo anterior es debido a la alta concentración de monosacáridos en el sustrato entrante los cuales son degradados a AGV. También es notorio un aumento en la concentración de acetato a la vez que la concentración de los AGV decrece, debido a que estos últimos reaccionan para producir acetato. Este comportamiento de los AGV y el acetato también fue encontrado por Massé & Droste (2000) y Massé et al. (1996).

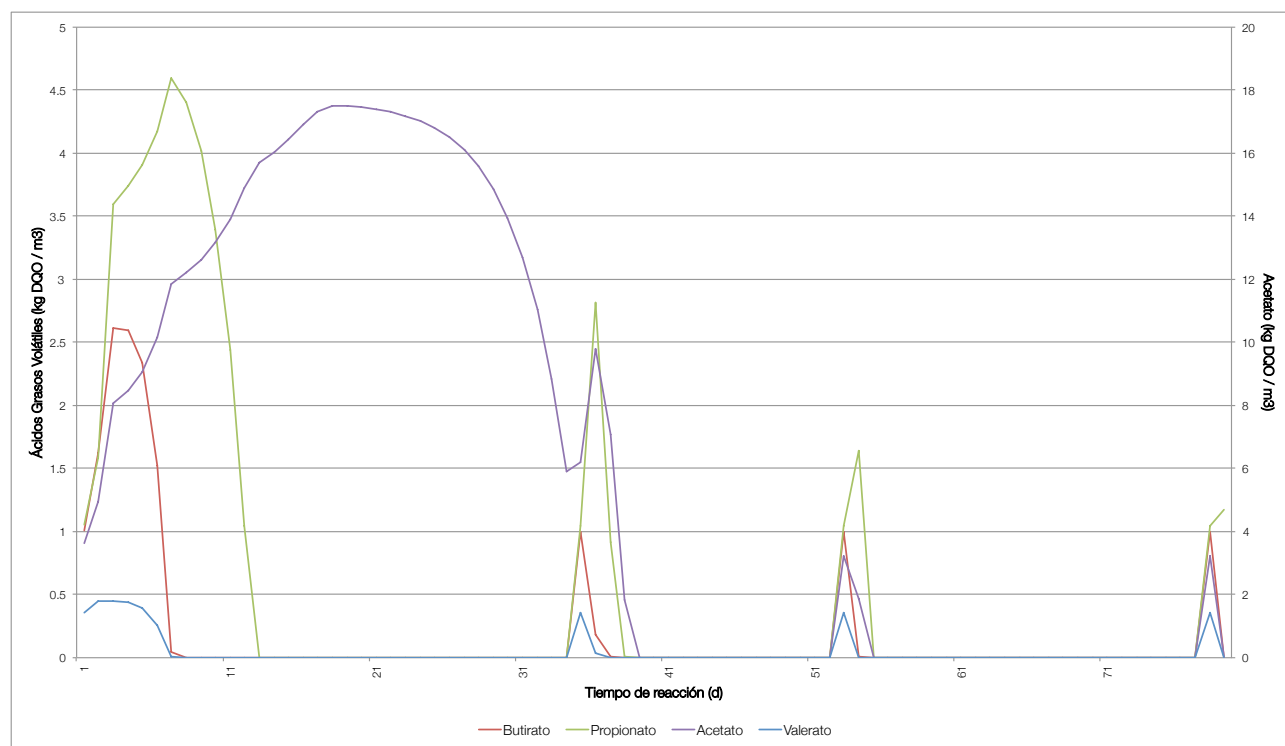


Figura 7-5. Comportamiento de las concentraciones de AGV en el reactor ASBR.

El pH en el reactor éste presentó una gran fluctuación durante el periodo de aclimatación teniendo variaciones desde 7.5 a 8.4. En los ciclos subsecuentes se observa una estabilidad en los valores del pH presentando variaciones entre 7.3 y 7.9 al momento de que el reactor alcanza la estabilidad. En la figura 7-6 se muestra la correlación que existe entre el pH y la concentración de carbono inorgánico en el reactor. El aumento en la concentración de pH representa un aumento en la alcalinidad resultando en un aumento del pH.

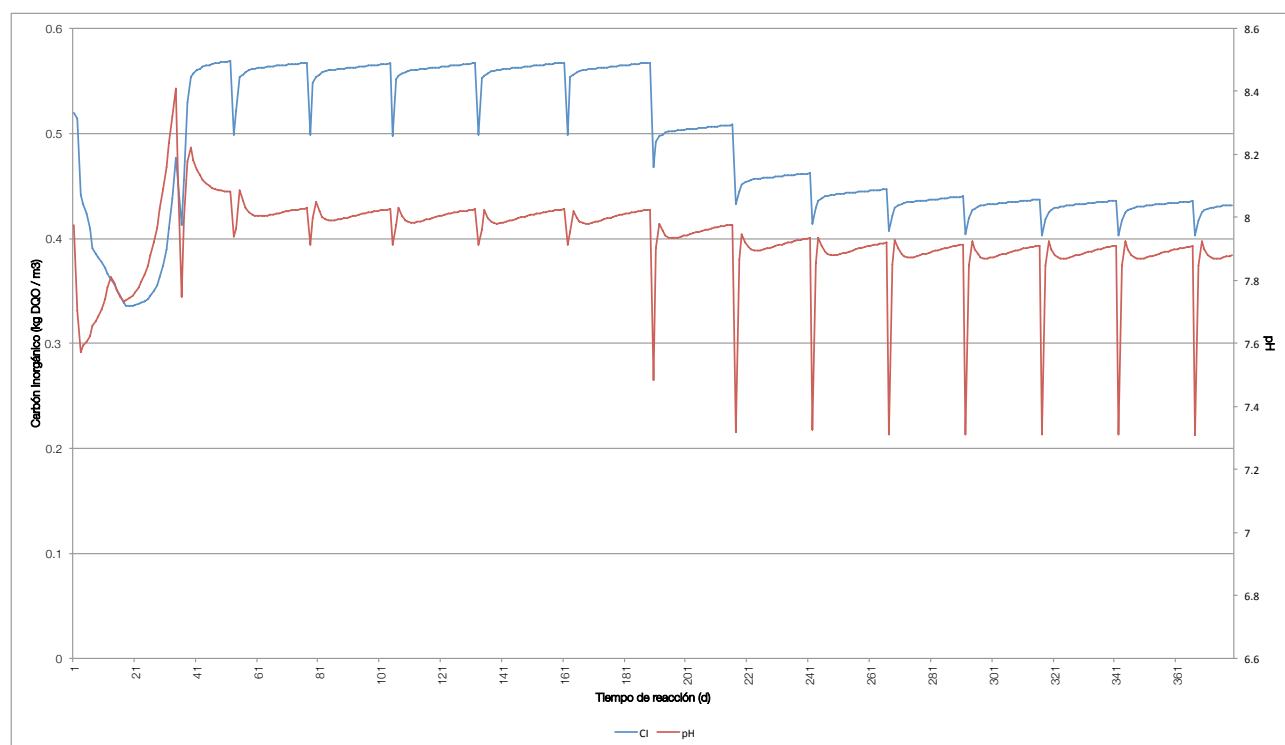


Figura 7-6 Comportamiento del pH con respecto a la concentración de CI en un reactor ASBR.

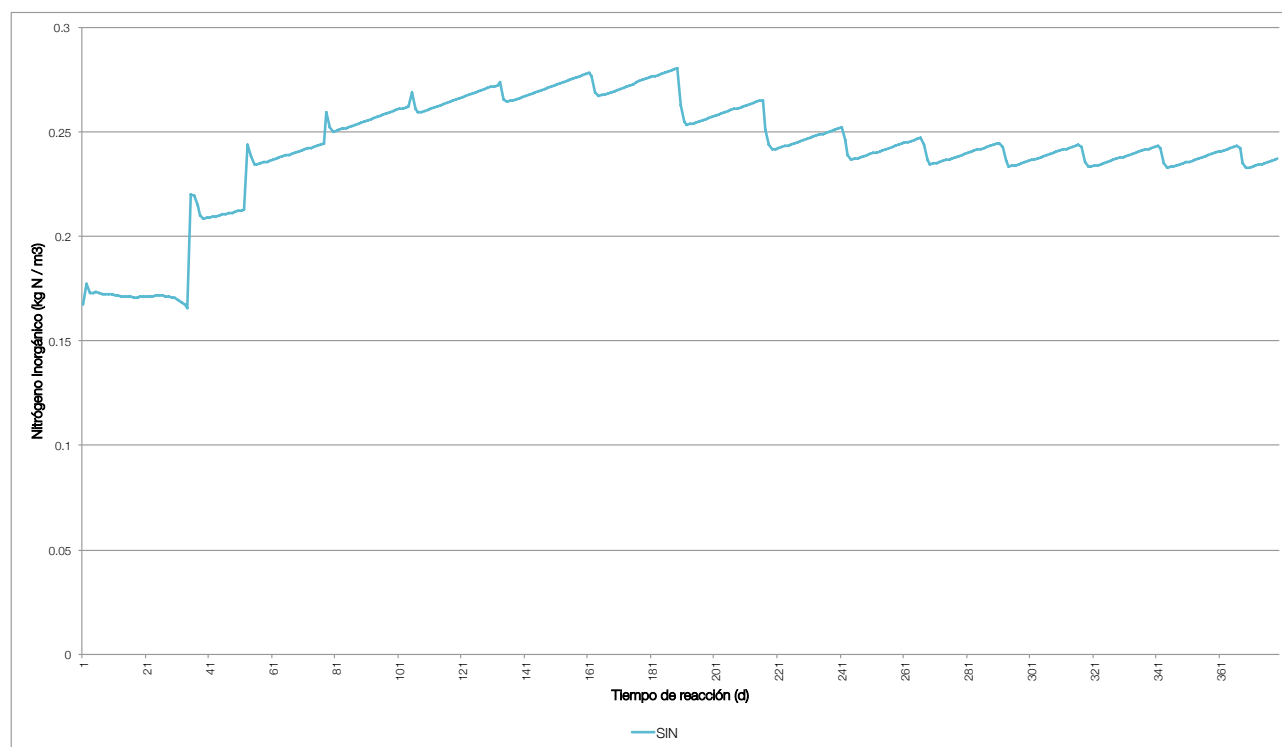


Figura 7-7. Comportamiento del Nitrógeno Inorgánico en un reactor ASBR.

En la figura 7-7 se muestra el comportamiento de las concentraciones de NI. En el primer ciclo de funcionamiento del reactor ASBR se observa una dilución de la concentración de NI con respecto a la concentración en el sustrato de entrada, disminuyendo de 0.275 kmol-N/m^3 a $0.1675 \text{ kmol-N/m}^3$, entre los ciclos 2 y 7 se presenta un aumento de la concentración de NI con pequeñas disminuciones en cada cambio de ciclo llegando a una concentración máxima de 0.278 kmol-N/m^3 . En los ciclos subsecuentes se observa una disminución en la concentración de NI hasta llegar a un estado estacionario con concentraciones entre 0.2328 y 0.243 kmol-N/m^3 . A pesar de éstas fluctuaciones en la concentración de NI y de la disminución general que existe con respecto a la concentración de entrada, los valores que se presentan a lo largo del funcionamiento del ASBR son mayores que los encontrados por Chen et al. (2008) quien menciona que a concentraciones de $0.0357 \text{ kmol-N/m}^3$ (550 mg-N/L) se pueden producir inhibiciones en las poblaciones de bacterias metanogénicas.

El comportamiento de las poblaciones de metanógenos acetoclásticos (X_{ac}) y metanógenos hidrogenófilos (X_{H_2}) se muestra en la figura 7-6 donde se observa que, como se explica en el párrafo anterior, debido a las altas concentraciones de NI existentes en el reactor existe inhibición en el crecimiento de las bacterias metanogénicas acetoclásticas resultando en un decremento exponencial de la concentración X_{ac} a partir del segundo ciclo de uso del reactor. Sin embargo, la población de X_{H_2} no se ve afectada por esta inhibición y presenta un crecimiento continuo dentro de los primeros 2 ciclos de uso del reactor ASBR hasta llegar a un

comportamiento estacionario después del séptimo ciclo. La existencia de la población de metanógenos consumidores de hidrógeno resultó en una disminución de la presión parcial de H_2 la cual se mantuvo en valores entre 10^{-5} y 10^{-6} atm creando condiciones óptimas en el reactor para la adaptación y el crecimiento de la población de bacterias sintróficas oxidantes de acetato (X_{SAO}) las cuales son menos sensibles a las concentraciones de NI pero tienen un tiempo de generación mucho mayor con respecto a otras poblaciones bacterianas. Ésto último se aprecia en la figura 7-5 donde se muestra que la concentración de X_{SAO} presenta un crecimiento poco visible durante los primeros 20 días de uso del reactor y una vez adaptado a las condiciones del mismo la concentración de X_{SAO} presentan un crecimiento exponencial, contrario al comportamiento de las poblaciones metanogénicas las cuales presentan un aumento en sus concentraciones desde los primeros días. Además de esto, su crecimiento continuo durante el funcionamiento del reactor es debido a los TRS resultantes los cuales permiten la adaptación de esta población de microorganismos, lo que resultaría más complicado en un reactor CSTR fijando el mismo TRH que el obtenido en el simulador ya que como se mencionó anteriormente éste tipo de reactores el TRS es igual al TRH.

El resto de las poblaciones bacterianas presentan un crecimiento sostenido hasta llegar a la estabilidad en el ciclo 9 donde también se observan unos picos de caída de concentración de biomasa los cuales son causados por la purga de lodos en el reactor. Lo anterior se muestra en las figuras 7-7 y 7-8.

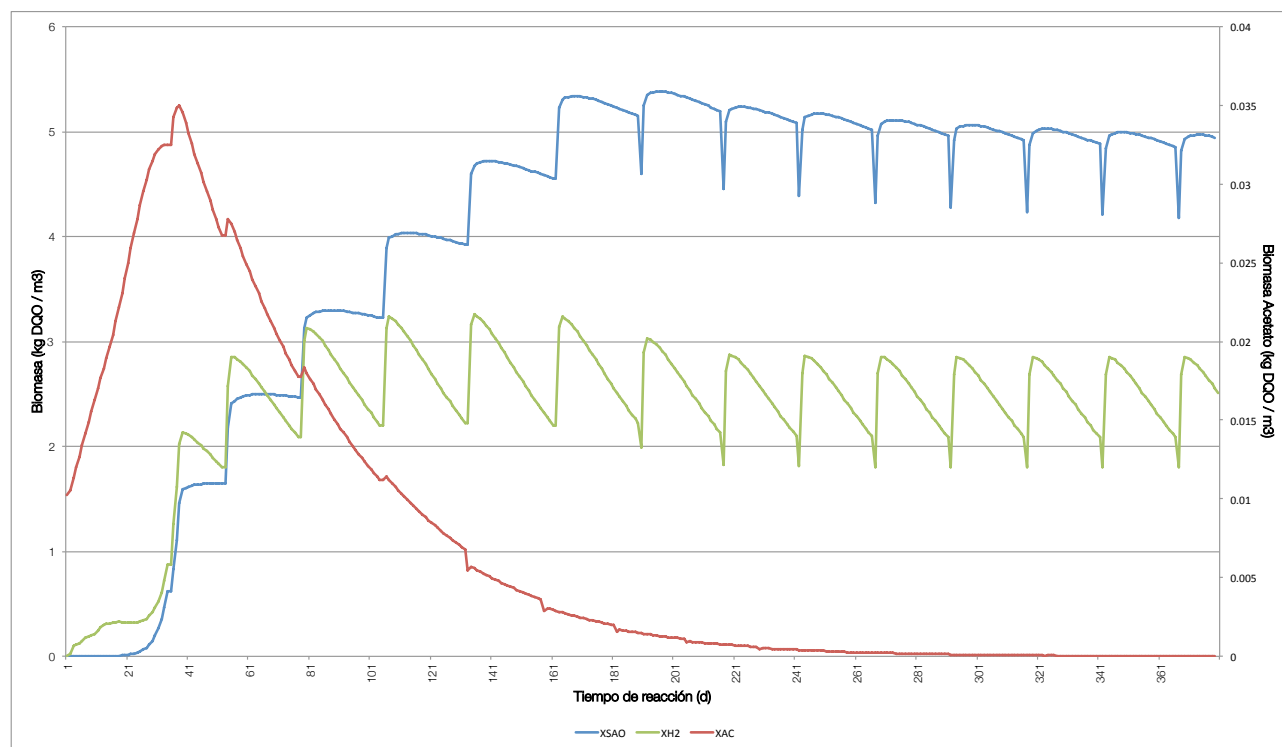


Figura 7-6. Comportamiento de la biomasa metanogénica y biomasa SAO dentro del reactor ASBR.

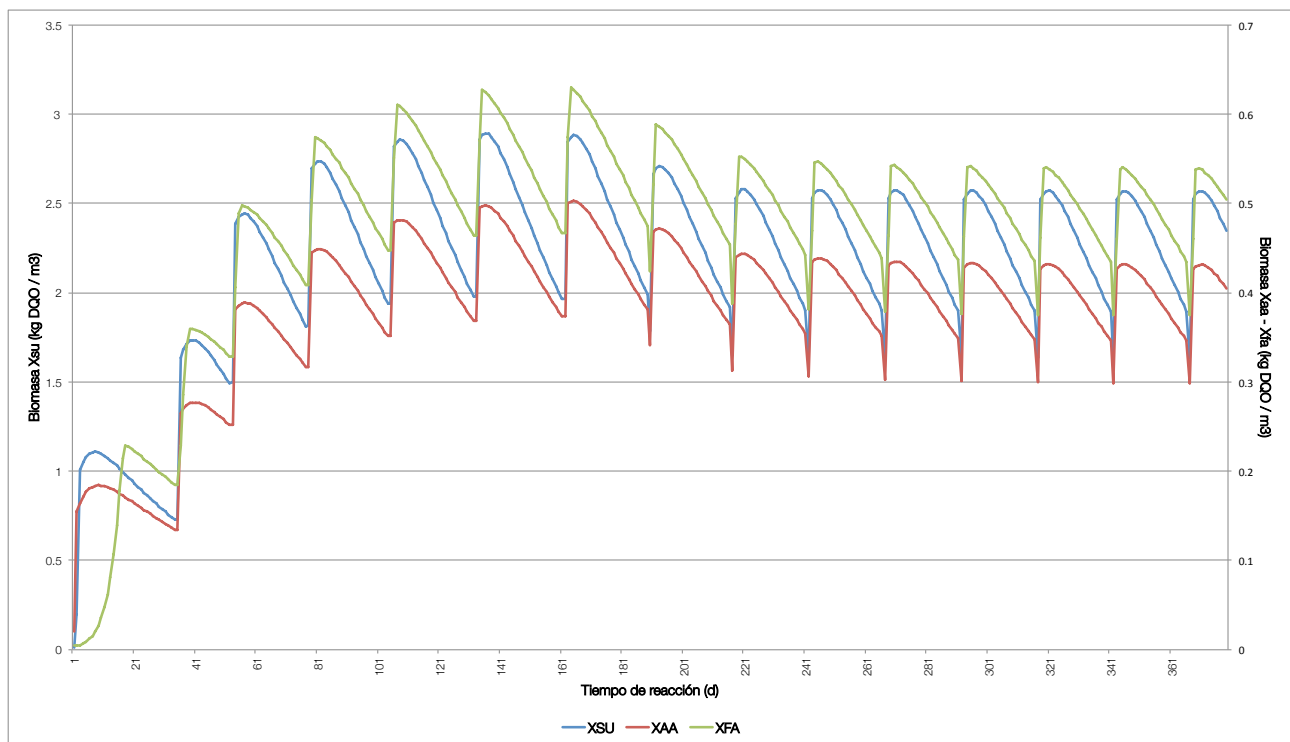


Figura 7-7. Comportamiento de las poblaciones bacterianas encargadas de la acidogénesis dentro del reactor ASBR.

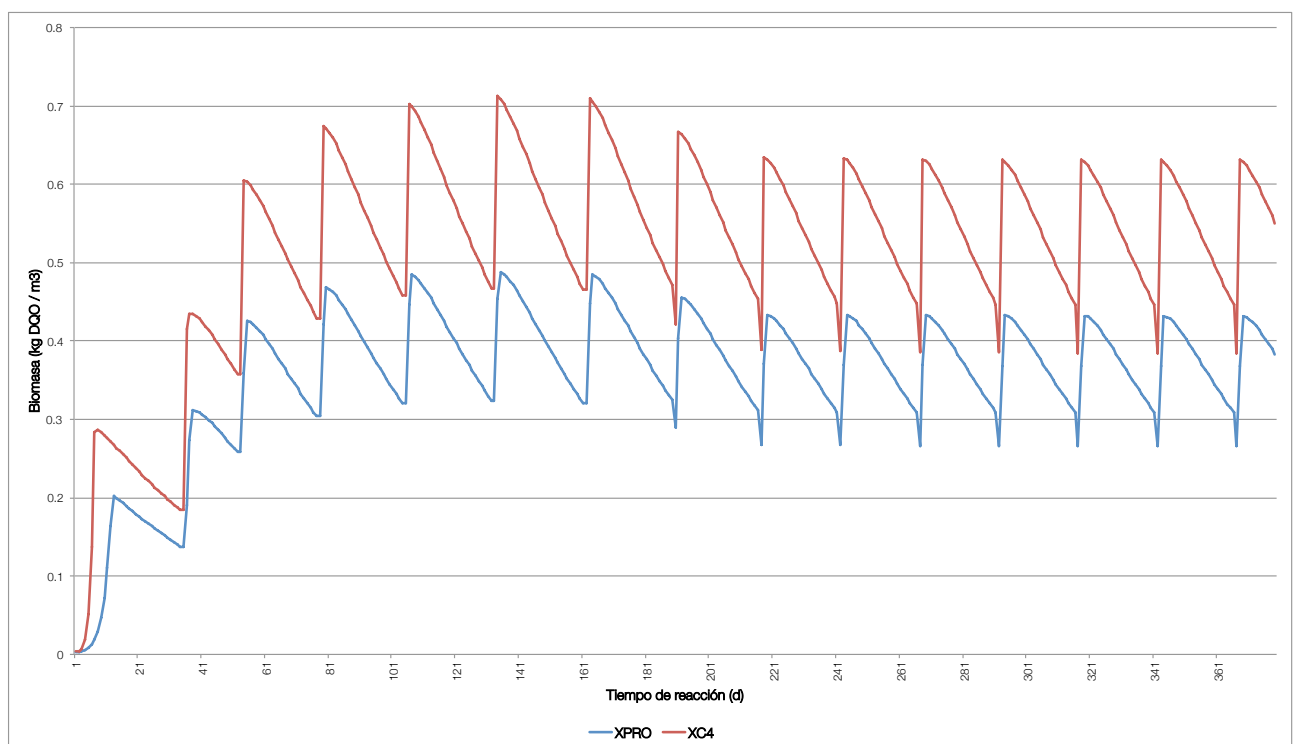


Figura 7-8. Comportamiento de las poblaciones bacterianas encargadas de la acetogénesis dentro del reactor ASBR.

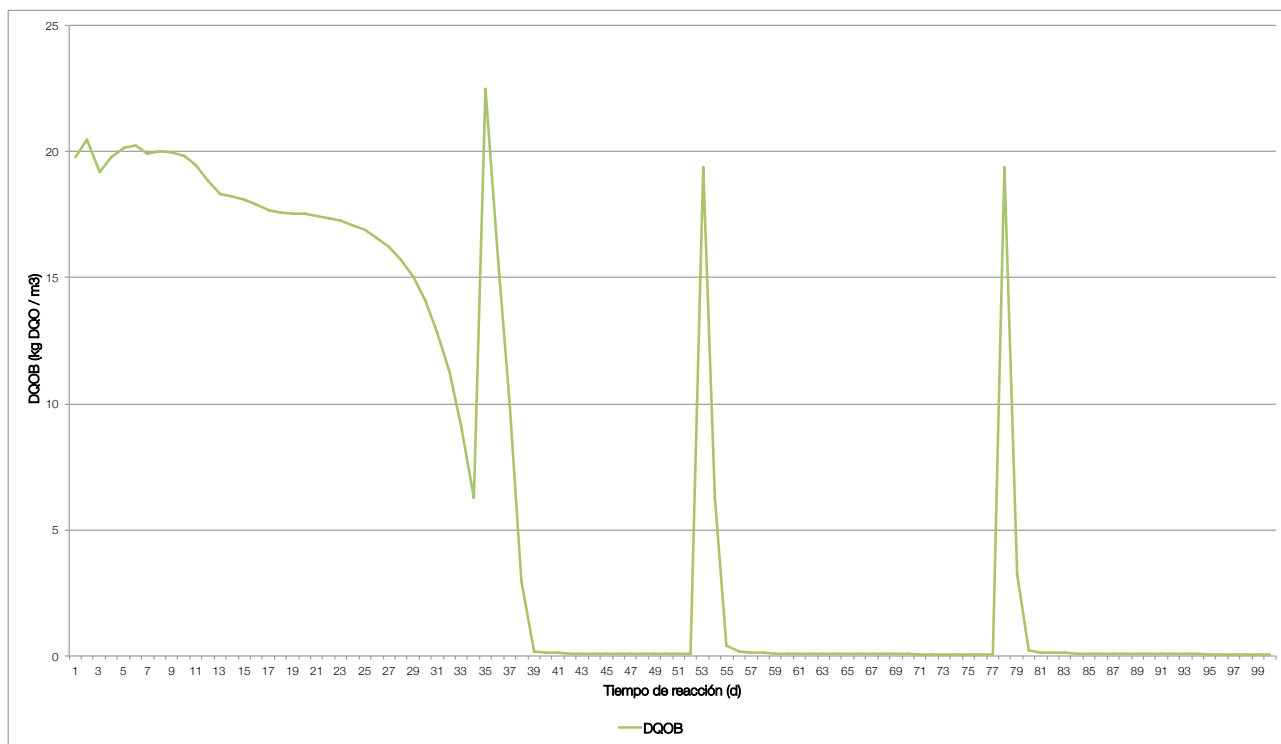


Figura 7-9. Comportamiento de la DQO biodegradable en el reactor ASBR.

Por último, el comportamiento de la DQO biodegradable en la etapa de aclimatación del reactor, muestra un comportamiento similar al mostrado por Massé & Droste (2000), con un ligero aumento en la concentración los primeros días y un lento consumo durante los días subsiguientes en lo que se da el crecimiento de las poblaciones bacterianas. Una vez terminada la etapa de aclimatación se observa una actividad más rápida en el consumo de éste, justificada por el comportamiento de la relación F/M al comienzo de cada ciclo, como se mostró anteriormente.

8. Conclusiones

Los modelos y simuladores numéricos son herramientas que nos ayudan en el diseño, operación, control y optimización en este caso de los reactores anaerobios. El objetivo del trabajo fue desarrollar un simulador para conocer el comportamiento de la operación de Reactores Anaerobios Secuenciales Discontinuos ASBR durante la digestión anaerobia de residuos con alto contenido de amonio.

Utilizando parámetros obtenidos de la literatura, el simulador desarrollado mostró que los resultados obtenidos son similares a los reportados por otros autores en las curvas de las curvas de sustrato, biogás y metano.

El ajuste del modelo ADM1 para la inclusión de la cinética de crecimiento de las bacterias SAO permitió observar varios fenómenos importantes provocados por las altas concentraciones de nitrógeno inorgánico en el reactor. El primer fenómeno observado fue la inhibición en el crecimiento de la población de bacterias metanogénicas acetoclásticas debido a las altas concentraciones de nitrógeno amoniacal (N-NH_4) en reactor, el segundo fenómeno observado fue la adaptación de la población de bacterias SAO a las condiciones del reactor consumiendo el acetato que dejaron de consumir los metanógenos acetoclásticos y produciendo hidrógeno. El tercer fenómeno observado fue el crecimiento continuo de la población de metanógenos hidrogenófilos los cuales consumen el H_2 producido por las bacterias SAO y a la vez mantienen la presión parcial de H_2 en valores aptos para el crecimiento de las bacterias SAO, demostrando la simbiosis que existe en estas dos poblaciones bacterianas.

Si bien es cierto que los resultados del simulador se adaptan a comportamientos reportados en bibliografía, se considera necesario un ajuste del simulador con un estudio experimental a efectos de mejorar la eficiencia y precisión del simulador del comportamiento de un reactor ASBR. Del mismo modo, debido a las consideraciones tomadas para el desarrollo del simulador, se considera que este trabajo puede servir de base para futuras optimizaciones por lo que se propone tomar en cuenta la existencia de reacción en la etapa de alimentación del reactor y así conocer el efecto del tiempo de llenado sobre ciertos parámetros, y detallar parámetros de sedimentación con datos experimentales del sustrato a utilizar en el simulador para obtener una mayor precisión en los tiempo de ciclo y no tener que considerar los tiempos diferentes a los de reacción despreciables.

En general se concluye que de acuerdo con los resultados expuestos se logra el objetivo planteado, esperando que este trabajo sirva de aportación para futuros estudios en el área.

9. Bibliografía

Angelidaki, I., & Sanders, W. (2004). Assessment of the anaerobic biodegradability of macropollutants. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*, 3, 117-129.

Angelidaki, I., Karakashev, D., Batstone, D. J., & Trably, E. (2006). Acetate oxidation is the dominant methanogenic pathway from acetate in the absence of methanosaetaceae. *Applied and Environmental Microbiology*, 72(7), 5138-41. doi:10.1128/AEM.00489-06

Appels, L., Baeyens, J., Degreè, J., & Dewil, R. (2008). Principles and potential of the anaerobic digestion of waste-activated sludge. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34(6), 755-781. doi:10.1016/j.pecs.2008.06.002

Appels, L., Lauwers, J., Degreè, J., Helsen, L., Lievens, B., Willems, K., . . . Dewil, R. (2011). Anaerobic digestion in global bio-energy production: Potential and research challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 15(9), 4295-4301. doi:10.1016/j.rser.2011.07.121

Balk, M., Weijma, J., & Stams, A. J. M. (2002). *Thermotoga lettingae* sp. Nov., A novel thermophilic, methanol-degrading bacterium isolated from a thermophilic anaerobic reactor. *International Journal of Systematic and Evolutionary Microbiology*, 52(4), 1361-1368. doi:10.1099/ijs.0.02165-0

Bastone, D. J., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhnyi, S. V., Pavlostathis, S. G., Rozzi, A., . . . Vavilin, V. A. (2002). *Anaerobic digestion model no 1 (ADM1)*. IWA Publishing.

Batstone, D. J. (2006). Mathematical modelling of anaerobic reactors treating domestic wastewater: Rational criteria for model use. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*, 5(1), 57-71. doi:10.1007/s11157-005-7191-z

Batstone, D. J., Keller, J., Newell, R. B., & Newland, M. (2000). Modelling anaerobic degradation of complex wastewater. II: Parameter estimation and validation using slaughterhouse effluent. *Bioresource Technology*, 75(1), 75-85. doi:/10.1016/S0960-8524(00)00019-5

Bastone, D. J., Torrijos, M., Ruiz, C., & Schmidt, J. E. (2004). Use of an anaerobic sequencing batch reactor for parameter estimation in modelling of anaerobic digestion. *Water Science and Technology : A Journal of the International Association on Water Pollution Research*, 50(10), 295-303

Bergland, W., Botheju, D., Dinamarca, C., & Bakke, R. (2011). Considering culture adaptations to high ammonia concentration in ADM1. In SIMS 2011 the 52nd international conference of scandinavian simulation society . Västerås, Sweden.

Boe, K. (2006a). Online monitoring and control of the biogas process. PhD thesis.

Bonmatí A. (2001). Usos de l'Energia Tèrmica per a la Millora del Procés de Digestió Anaeròbia de Purins de Porc i per a la Recuperació de Productes d'Interès. Tesi doctoral. Universitat de Lleida.

Buffiere, P., Delgadillo, L. D., Steyer, J. S., Bernet, N., & Delgenes, J. P. (2008). Anaerobic digestion of solid wastes needs research to face an increasing industrial success. International Journal of Chemical Reactor Engineering, 6(A94).

Chen, Y., Cheng, J. J., & Creamer, K. S. (2008). Inhibition of anaerobic digestion process: A review. Bioresource Technology, 99(10), 4044-64. doi:10.1016/j.biortech.2007.01.057

Cheong, D. Y., & Hansen, C. L. (2008). Effect of feeding strategy on the stability of anaerobic sequencing batch reactor responses to organic loading conditions. Bioresource Technology, 99(11), 5058-5068. doi:/10.1016/j.biortech.2007.08.084

Chynoweth, D. P., Owens, J. M., & Legrand, R. (2001). Renewable methane from anaerobic digestion of biomass. Renewable Energy, 22, 1-8.

Demirel, B., & Yenigün, O. (2002). Two-phase anaerobic digestion processes: A review. Journal of Chemical Technology & Biotechnology, 77(7), 743-755. doi:10.1002/jctb.630

Deublein, D., & Steinhauser, A. (2011). Biogas from waste and renewable resources: An introduction. Wiley.

Donoso-Bravo, A., Carballa, M., Filippi, G. R., & Chamy, R. (2009). Treatment of low strength sewage with high suspended organic matter content in an anaerobic sequencing batch reactor and modeling application. Electro Journal of Biotech, 12(3). doi:10.2225/vol12-issue3-fulltext-15

Ferry, J. G. (1992). Methane from acetate. Journal of Bacteriology, 174(17), 5489-5495. Retrieved from <http://jb.asm.org/content/174/17/5489.abstractN2>

Fiotto, S. (2013). Modelamiento y simulación de reactores secuenciales discontinuos en un proceso de digestión anaeróbica. Master Thesis. Retrieved from <http://www.edutecne.utn.edu.ar>

Flotats, X. (2014). Capítulo 2: Dinámica del proceso de digestión anaerobia. In De Residuo a Recurso, el Camino hacia la sostenibilidad: Procesos de biotransformación de la materia orgánica. Aspectos biológicos de la digestión anaerobia (Vol. 2). Madrid: Ediciones Mundi-Prensa.

Galí, A., Benabdallah, T., Astals, S., & Mata-Alvarez, J. (2009). Modified version of ADM1 model for agro-waste application. *Bioresource Technology*, 100(11), 2783-2790. doi:10.1016/j.biortech.2008.12.052

Girault, R., Bridoux, G., Nauleau, F., Poullain, C., Buffet, J., Steyer, J. P., . . . Béline, F. (2012). A waste characterisation procedure for ADM1 implementation based on degradation kinetics. *Water Research*, 46(13), 4099-110. doi:10.1016/j.watres.2012.04.028

Hansen, K. H., Angelidaki, I., & Ahring, B. K. (1998). Anaerobic digestion of swine manure: Inhibition by ammonia. *Water Research*, 32(1), 5-12.

Hattori, S. (2008). Syntrophic acetate-oxidizing microbes in methanogenic environments. *Microb. Environ.*, 23(2), 118-127. doi:10.1264/jsme2.23.118

Hattori, S., Galushko, A. S., Kamagata, Y., & Schink, B. (2005). Operation of the CO dehydrogenase/acetyl coenzyme A pathway in both acetate oxidation and acetate formation by the syntrophically acetate-oxidizing bacterium *thermacetogenium phaeum*. *Journal of Bacteriology*, 187(10), 3471-6. doi:10.1128/JB.187.10.3471-3476.2005

Hattori, S., Kamagata, Y., Hanada, S., & Shoun, H. (2000). *Thermacetogenium phaeum* gen. Nov., Sp. Nov., A strictly anaerobic, thermophilic, syntrophic acetate-oxidizing bacterium. *International Journal of Systematic and Evolutionary Microbiology*, 50, 1601-1609.

Hwang, M. H., Jang, N. J., Hyun, S. H., & Kim, I. S. (2004). Anaerobic bio-hydrogen production from ethanol fermentation: The role of ph. *Journal of Biotechnology*, 111(3), 297-309. doi:10.1016/j.jbiotec.2004.04.024

Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). 1996. Revised 1996 IPCC Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories, Reference Manual (Revised). v.3.

Keshtkar, A., Ghaforian, H., Abolhamd, G., & Meyssami, B. (2001). Dynamic simulation of cyclic batch anaerobic digestion of cattle manure. *Bioresource Technology*, 80, 9-17.

Lee, M. J., & Zinder, S. H. (1988). Isolation and characterization of a thermophilic bacterium which oxidizes acetate in syntrophic association with a methanogen and which grows acetogenically on H₂-CO₂. *Applied and Environmental Microbiology*, 54(1), 124-129.

Lettinga, G. (1996). Sustainable integrated biological wastewater treatment. *Water Science and Technology : A Journal of the International Association on Water Pollution Research*, 33(3), 85-98. doi:/10.1016/0273-1223(96)00303-4

Lidholm, O., & Ossiansson, E. (2008). Validation and calibration of the siergrist model with uncertainty and sensitivity analysis. Master thesis.

Liu, T., & Sung, S. (2002). Ammonia inhibition on thermophilic aceticlastic methanogens. *Water science and technology : A journal of the international association on* (Vol. 45, pp. 113-20). England.

Massé, D. I., & Droste, R. L. (2000). Comprehensive model of anaerobic digestion of swine manure slurry in a sequencing batch reactor. *Water Research*, 34(12), 3087-3106.

Massé, D. I., & Masse, I. (2000). Treatment of slaughterhouse wastewater in anaerobic sequencing batch reactors. *Canadian Agriculture Engineering* , 42(3), 131-137.

Massé, D. I., Patni, N. K., Droste, R. L., & Kennedy, K. J. (1996). Operation strategies for psychrophilic anaerobic digestion of swine manure slurry in sequencing batch reactors. *Can J Civ Eng*, 23(6), 1285-1294. doi:doi: 10.1139/l96-937

Moody, L., Burns, R., Wei, W. H., & Spajic, R. (2009). Use of biochemical methane potential (BMP) assays for predicting and enhancing anaerobic digester performance. In Osijek: Poljoprivredni Fakultet Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku. Retrieved from CABDirect2.

Moreno Mingorance, M. A. (2014). Modelización de la dinámica de los microorganismos anaerobios sintróficos oxidantes del ácido acético (SAO). Bachelors Thesis. Retrieved from <http://hdl.handle.net/2099.1/22190>

Ndegwa, P. M., Hamilston, D. W., Lalman, J. A., & Cumba, H. J. (2005). Optimization of anaerobic sequencing batch reactors treating dilute swine slurries. *Transactions of ASAE*, 48(4), 1575-1583.

Parkin, G.F., Miller, S.W., (1983). Response of methane fermentation to continuous addition of selected industrial toxicants. In: *Proceedings of the 37th Purdue Industrial Waste Conference*, West Lafayette, Ind.

Pohland, F. G., & Ghosh, S. (1971). Developments in anaerobic stabilization of organic wastes the two-phase concept. *Environmental Letters*, 1(4), 255-266. doi:10.1080/00139307109434990

Rajagopal, R., Massé, D. I., & Singh, G. (2013). A critical review on inhibition of anaerobic digestion process by excess ammonia. *Bioresource Technology*, 143, 632-41. doi:10.1016/j.biortech.2013.06.030

Rittmann, B. E., & McCarty, P. L. (2001). *McGraw-Hill series in water resources and environmental engineering: Environmental biotechnology: Principles and applications*. McGraw-Hill.

Rodríguez, A. (2013). *Anaerobic digestion of animal by-products, pre-treatments and co-digestion*. PhD thesis.

Rosenkranz, F. (2013). *Estudio del comportamiento de reactores anaerobios de tipo ASBR frente a compuestos de difícil degradación y/o efectos negativos*. PhD thesis.

Ruiz, C., Torrijos, M., Sousbie, P., Lebrato Martinez, J., & Moletta, R. (2001). The anaerobic SBR process: Basic principles for design and automation. *Water Science and Technology*, 43(3), 201-208.

Schnürer, A., Schink, B., & Svensson, B. H. (1996). *Clostridium ultunense* sp. Nov., A mesophilic bacterium oxidizing acetate in syntrophic association with a hydrogenotrophic methanogenic bacterium. *International Journal of Systematic Bacteriology*, 46(4), 1145-1152.

Tambone, F., Genevini, P., D'Imporzano, G., & Adani, F. (2009). Assessing amendment properties of digestate by studying the organic matter composition and the degree of biological stability during the anaerobic digestion of the organic fraction of MSW. *Bioresource Technology*, 100(12), 3140-3142. doi:/10.1016/j.biortech.2009.02.012

Turovskiy, I. S., & Mathai, P. K. (2006). *Wastewater sludge processing*. Wiley.

Ward, A. J., Hobbs, P. J., Holliman, P. J., & Jones, D. L. (2008). Optimisation of the anaerobic digestion of agricultural resources. *Bioresource Technology*, 99(17), 7928-40. doi:10.1016/j.biortech.2008.02.044

Westerholm, M. (2012). Biogas production through the syntrophic acetate-oxidising pathway. PhD Thesis.

Westerholm, M., Dolfig, J., Sherry, A., Gray, N. D., Head, I. M., & Schnürer, A. (2011). Quantification of syntrophic acetate-oxidizing microbial communities in biogas processes. *Environmental Microbiology Reports*, 3(4), 500-5. doi:10.1111/j.1758-2229.2011.00249.x

Westerholm, M., Roos, S., & Schnürer, A. (2010). *Syntrophaceticus schinkii* gen. Nov., Sp. Nov., An anaerobic, syntrophic acetate-oxidizing bacterium isolated from a mesophilic anaerobic filter. *FEMS Microbiology Letters*, 309(1), 100-104. doi:10.1111/j.1574-6968.2010.02023.x

Westermann, P., Ahring, B. K., & Mah, R. A. (1989). Temperature compensation in *methanosarcina barkeri* by modulation of hydrogen and acetate affinity. *Applied and Environmental Microbiology*, 55(5), 1262-1266. Retrieved from PMC: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC184287/>

Winter, J. (1999). *Biotechnology: Biotechnology, environmental processes I*. Wiley.

Yu, L., Wensel, P. C., Ma, J., & Schulin, C. (2013). Mathematical modeling in anaerobic digestion (AD). *Bioremediation & Biodegradation*, S4(003). doi:10.4172/2155-6199.S4-003

Zaher, U. E. (2005). Modeling and monitoring the anaerobic digestion process in view of optimization and smooth operation of WWTP's. PhD thesis.

Zaiat, M., Rodrigues, J. A. D., Ratusznei, S. M., De Camargo, E. F. M., & Borzani, W. (2001). Anaerobic sequencing batch reactors for wastewater treatment: A developing technology. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 55(1), 29-35. doi:10.1007/s002530000475